

黄昆 《固体物理》

习题解答

小木虫物理版出品

2010-4

目录

第一章	习题	1
第二章	习题	6
第三章	习题	10
第五章	习题	31
第六章	习题	36
第七章	习题	42

小木虫物理版

第一章 习题

1.1 如果将等体积球分别排列下列结构，设 x 表示刚球所占体积与总体积之比，证明

结构	x
简单立方(书P2, 图1-2)	$\pi/6 \approx 0.52$
体心立方(书P3, 图1-3)	$\sqrt{3}\pi/8 \approx 0.68$
面心立方(书P3, 图1-7)	$\sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$
六方密排(书P4, 图1-6)	$\sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$
金刚石(书P5, 图1-8)	$\sqrt{3}\pi/16 \approx 0.34$

解 设 n 为一个晶胞中的刚性原子数， r 表示刚性原子球半径， V 表示晶胞体积，则致密度为： $\rho = \frac{4\pi nr^3}{3V}$ （设立方晶格的边长为 a ） r 取原子球相切时的半径于是

结构	r	n	V	ρ
简单立方	$a/2$	1	a^3	$\pi/6 \approx 0.52$
体心立方	$a/2$	1	a^3	$\sqrt{3}\pi/8 \approx 0.68$
面心立方	$\sqrt{3}a/4$	2	a^3	$\sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$
六方密排	$\sqrt{2}a/4$	4	a^3	$\sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$
金刚石	$a/2$	2	$\sqrt{2}a^3$	$\sqrt{3}\pi/16 \approx 0.34$

1.2 证明理想的六角密堆积结构（hcp）的轴比 $\frac{c}{a} = \left(\frac{3}{8}\right)^{1/2} \approx 1.633$

解 由1.1题，六角密排中 $h = \sqrt{\frac{2}{3}}a = 2\sqrt{\frac{2}{3}}r - \frac{c}{2}$ ，故 $\frac{c}{a} = \left(\frac{3}{8}\right)^{1/2} \approx 1.633$

1.3 证明：体心立方晶格的倒格子是面心立方；面心立方晶格的倒格子是体心立方

解 由倒格子定义 $\bar{b}_1 = 2\pi \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3}$ $\bar{b}_2 = 2\pi \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3}$ $\bar{b}_3 = 2\pi \frac{\bar{a}_1 \times \bar{a}_2}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3}$

体心立方格子原胞基矢 $\bar{a}_1 = \frac{a}{2}(-\bar{i} + \bar{j} + \bar{k})$ ， $\bar{a}_2 = \frac{a}{2}(\bar{i} - \bar{j} + \bar{k})$ ， $\bar{a}_3 = \frac{a}{2}(\bar{i} - \bar{j} + \bar{k})$

倒格子基矢 $\bar{b}_1 = 2\pi \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3} = \frac{2\pi}{v_0} \cdot \frac{a}{2}(\bar{i} - \bar{j} + \bar{k}) \times \frac{a}{2}(\bar{i} + \bar{j} - \bar{k})$

$$= \frac{2\pi}{v_0} \cdot \frac{a^2}{4} (\bar{i} - \bar{j} + \bar{k}) \times (\bar{i} + \bar{j} - \bar{k}) = \frac{2\pi}{a} (\bar{j} + \bar{k})$$

$$\text{同理 } \bar{b}_2 = 2\pi \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3} = \frac{2\pi}{a} (\bar{i} + \bar{k}) \quad \bar{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\bar{i} + \bar{j})$$

可见由 $\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3$ 为基矢构成的格子为面心立方格子

面心立方格子原胞基矢

$$\bar{a}_1 = a(\bar{j} + \bar{k})/2$$

$$\bar{a}_2 = a(\bar{k} + \bar{i})/2$$

$$\bar{a}_3 = a(\bar{i} + \bar{j})/2$$

$$\text{倒格子基矢 } \bar{b}_1 = 2\pi \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3} \quad \bar{b}_1 = \frac{2\pi}{a} (-\bar{i} + \bar{j} + \bar{k})$$

$$\text{同理 } \bar{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (\bar{i} - \bar{j} + \bar{k}) \quad \bar{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\bar{i} - \bar{j} + \bar{k})$$

可见由 $\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3$ 为基矢构成的格子为体心立方格子

1.4 证明倒格子原胞的体积为 $\frac{(2\pi)^3}{v_0}$ ，其中 v_0 为正格子原胞体积

$$\text{证 倒格子基矢 } \bar{b}_1 = 2\pi \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3}$$

$$\bar{b}_2 = 2\pi \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3}$$

$$\bar{b}_3 = 2\pi \frac{\bar{a}_1 \times \bar{a}_2}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3}$$

$$\text{倒格子体积 } v_0^* = \bar{b}_1 \cdot (\bar{b}_2 \times \bar{b}_3)$$

$$v_0^* = \frac{(2\pi)^3}{v_0^3} (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3) \cdot (\bar{a}_3 \times \bar{a}_1) \times (\bar{a}_1 \times \bar{a}_2) \quad v_0^* = \frac{(2\pi)^3}{v_0}$$

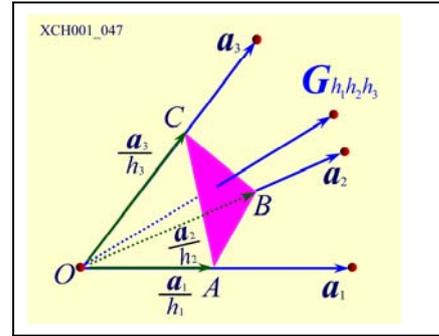
1.5 证明：倒格子矢量 $\vec{G} = h_1 \bar{b}_1 + h_2 \bar{b}_2 + h_3 \bar{b}_3$ 垂直于密勒指数为 $(h_1 h_2 h_3)$ 的晶面系。

证：

$$\overline{CA} = \frac{\bar{a}_1}{h_1} - \frac{\bar{a}_3}{h_3}, \quad \overline{CB} = \frac{\bar{a}_2}{h_2} - \frac{\bar{a}_3}{h_3}$$

容易证明 $\vec{G}_{h_1 h_2 h_3} \cdot \overline{CA} = 0$
 $\vec{G}_{h_1 h_2 h_3} \cdot \overline{CB} = 0$

$\vec{G} = h_1 \bar{b}_1 + h_2 \bar{b}_2 + h_3 \bar{b}_3$ 与晶面系 $(h_1 h_2 h_3)$ 正交。



1.6 如果基矢 $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ 构成简单正交系

证明晶面族 (hkl) 的面间距为 $d = 1 / \sqrt{(\frac{h}{a})^2 + (\frac{k}{b})^2 + (\frac{l}{c})^2}$

说明面指数简单的晶面，其面密度较大，容易解理

证 简单正交系 $\bar{a} \perp \bar{b} \perp \bar{c}$ $\bar{a}_1 = a\bar{i}, \bar{a}_2 = b\bar{j}, \bar{a}_3 = c\bar{k}$

$$\text{倒格子基矢 } \bar{b}_1 = 2\pi \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3} \quad \bar{b}_2 = 2\pi \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3} \quad \bar{b}_3 = 2\pi \frac{\bar{a}_1 \times \bar{a}_2}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3}$$

$$\bar{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \bar{i}, \quad \bar{b}_2 = \frac{2\pi}{b} \bar{j}, \quad \bar{b}_3 = \frac{2\pi}{c} \bar{k}$$

$$\text{倒格子矢量 } \vec{G} = h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + l\bar{b}_3 = h \frac{2\pi}{a} \bar{i} + k \frac{2\pi}{b} \bar{j} + l \frac{2\pi}{c} \bar{k}$$

$$\text{晶面族 } (hkl) \text{ 的面间距 } d = \frac{2\pi}{|\vec{G}|} = 1 / \sqrt{(\frac{h}{a})^2 + (\frac{k}{b})^2 + (\frac{l}{c})^2}$$

面指数越简单的晶面，其晶面的间距越大

晶面上格点的密度越大，这样的晶面越容易解理

1.7 写出体心立方和面心立方晶格结构中，最近邻和次近邻的原子数，若立方边长为 a ，写出最近邻和次近邻原子间距

解

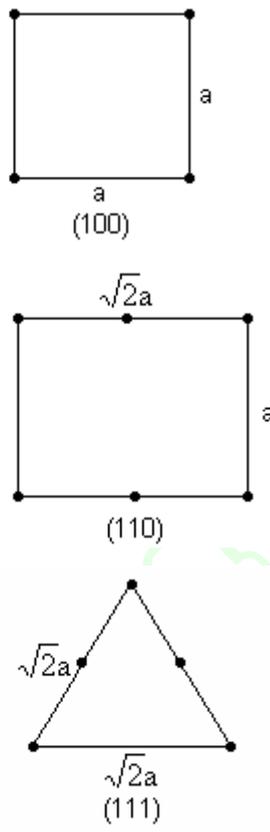
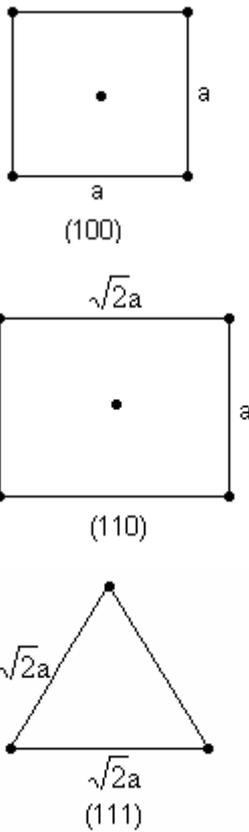
	简立方	面心立方	体心立方
最近邻数	6	12	8
最近邻间距	a	$\sqrt{2}a/2$	$\sqrt{3}a/2$
次近邻数	12	6	6
次近邻间距	$\sqrt{2}a$	a	a

1.7 画体心立方和面心立方晶格结构的金属在 (100) ， (110) ， (111) 面上原子排列。

解：

体心立方

面心立方



1.9 指出立方晶格(111)面与(100)面，(111)面与(110)面的交线的晶向

解 (111)面与(100)面的交线的 \overline{AB} —AB 平移，

A 与 O 重合。B 点位矢 $\vec{R}_B = -a\vec{j} + a\vec{k}$

(111) 与 (100) 面的交线的晶向 $\overline{AB} = -a\vec{j} + a\vec{k}$ —— 晶

向指数 $[0\bar{1}1]$

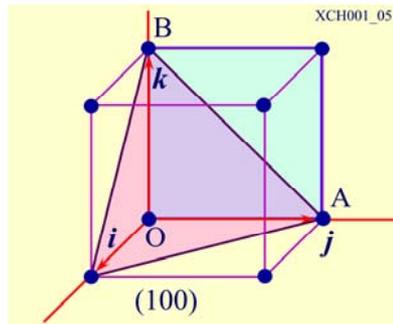
(111)面与(110)面的交线的 AB

—— 将 AB 平移，A 与原点 O 重合，B 点位矢

$\vec{R}_B = -a\vec{i} + a\vec{j}$

(111)面与(110)面的交线的晶向 $\overline{AB} = -a\vec{i} + a\vec{j}$

——晶向指数 $[\bar{1}10]$



1.10 找出立方体中保持x轴不变的所有对称操作，并指出他们中任意两个操作乘积的结果

解：立方体中保持x轴不变，可有绕x轴转 $\pi/2$ 、 π 、 $3\pi/2$ 加上不动 C_1 ，所有对称操作构

成群 $C_4: C_4 = (C_1 C_2 C_3 C_4)$ ，群中任意两元素乘积仍是群中元素。

1.11 证明六角晶体的介电常数张量为
$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}$$

证明 若 \vec{A} 是一旋转对称操作，则晶体的介电常数 ε 满足 $\vec{\varepsilon} = \vec{A}^T \vec{\varepsilon} \vec{A}$ ，对六角晶系，绕 x 轴（即 \vec{a} 轴）旋转 180 度和绕 z 轴（即 \vec{c} 轴）旋转 120 度都是对称操作，坐标变换矩阵分别为

$$\vec{A}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \vec{A}_z = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

假设六角晶系统的介电常数为 $\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$ 则由 $\vec{\varepsilon} = \vec{A}_x^T \vec{\varepsilon} \vec{A}_x$ 得

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & -\varepsilon_{12} & -\varepsilon_{13} \\ -\varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ -\varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \text{ 可见 } \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ 0 & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \text{ 将上式代入 } \vec{\varepsilon} = \vec{A}_z^T \vec{\varepsilon} \vec{A}_z$$

得
$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ 0 & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_{11} + 3\varepsilon_{22}}{4} + \frac{\sqrt{3}\varepsilon_{11} + \sqrt{3}\varepsilon_{22}}{4} & -\frac{\sqrt{3}\varepsilon_{11}}{4} + \frac{\sqrt{3}\varepsilon_{22}}{4} & -\frac{\sqrt{3}\varepsilon_{23}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}\varepsilon_{11}}{4} + \frac{\sqrt{3}\varepsilon_{22}}{4} & \frac{3\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}}{4} + \frac{\varepsilon_{22}}{4} & -\frac{\varepsilon_{23}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}\varepsilon_{23}}{2} & -\frac{\varepsilon_{23}}{2} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \text{ 所 以}$$

$\varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} = \varepsilon_{11} = 0$ 可得到六角晶系的介电常数为 $\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$ 选择相应的坐标变换

可得到
$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}$$

1.12 比较面心立方晶格、金刚石晶格、闪锌矿晶格、NaCl 晶格的晶系、布拉伐格子、平移群、点群、空间群。

晶格	晶系	布拉伐格子	点群	空间群
面心立方晶格	立方	面心立方	O_h	F_{m3m}
金刚石晶格	立方	面心立方	O_h	F_{d3m}
闪锌矿晶格	立方	面心立方	T_d	F_{43m}
NaCl 晶格的晶系	立方	面心立方	O_h	F_{m3m}

第二章 习题

2.1. 证明两种一价离子组成的一维晶格的马德隆常数为 $\alpha = 2 \ln 2$.

证 设想一个由正负两种离子相间排列的无限长的离子键，取任一负离子作参考离子（这样马德隆常数中的正负号可以这样取，即遇正离子取正号，遇负离子取负号），用 r 表示相邻离子间的距离，于是有

$$\frac{\alpha}{r} = \sum_j \frac{(\pm 1)}{r_{ij}} = 2 \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{2r} + \frac{1}{3r} - \frac{1}{4r} + \dots \right]$$

前边的因子 2 是因为存在着两个相等距离 r_i 的离子，一个在参考离子左面，一个在其右面，故对一边求和后要乘 2，马德隆常数为

$$\alpha = 2 \left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right]$$

$$\because \ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$$

$$\text{当 } x=1 \text{ 时, 有 } 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots = \ln 2 \quad \therefore \alpha = 2 \ln 2$$

2.2 讨论使离子电荷加倍所引起的对 NaCl 晶格常数及结合能的影响（排斥势看作不变）

$$\text{解 } u(r) = -\frac{\alpha e^2}{r} + \frac{C}{r^n}$$

$$\text{由 } \left. \frac{du}{dr} \right|_{r_0} = \frac{\alpha e^2}{r_0^2} - \frac{nC}{r_0^{n+1}} = 0 \text{ 解可得 } r_0(e) = \left(\frac{nC}{\alpha e^2} \right)^{\frac{1}{n+1}} \text{ 于是当 } e \text{ 变成 } 2e \text{ 时有}$$

$$r_0(2e) = \left(\frac{nC}{4\alpha e^2} \right)^{\frac{1}{n+1}} = 4^{\frac{1}{n+1}} r_0(e)$$

$$\text{结合能为 } u(r) = -\frac{\alpha e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \text{ 当 } e \text{ 变成 } 2e \text{ 时有 } u(2e) = -\frac{4\alpha e^2}{r_0(2e)} \left(1 - \frac{1}{n} \right) = u(e) \times 4^{\frac{n}{n+1}}$$

2.3 若一晶体的相互作用能可以表示为 $u(r) = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}$

求 1) 平衡间距 r_0 2) 结合能 W (单个原子的) 3) 体弹性模量 4) 若取 $m=2, n=10, r_0=0.3 \text{ nm}, W=4 \text{ eV}$ ，计算 α, β 值。

$$\text{解 } 1) \text{ 晶体内能 } U(r) = \frac{N}{2} \left(-\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n} \right)$$

$$\text{平衡条件 } \left. \frac{dU}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \quad -\frac{m\alpha}{r_0^{m+1}} + \frac{n\beta}{r_0^{n+1}} = 0 \quad r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}}$$

2) 单个原子的结合能 $W = -\frac{1}{2}u(r_0)$

$$u(r_0) = \left(-\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}\right) \Big|_{r=r_0} \quad W = \frac{1}{2}\alpha\left(1 - \frac{m}{n}\right)\left(\frac{n\beta}{m\alpha}\right)^{\frac{-m}{n-m}}$$

3) 体弹性模量 $K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_{V_0} \cdot V_0$

晶体的体积 $V = NA r^3$ —— A 为常数，N 为原胞数目

$$\begin{aligned} \text{晶体内能 } U(r) &= \frac{N}{2} \left(-\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}\right) \\ &= \frac{N}{2} \left(\frac{m\alpha}{r^{m+1}} - \frac{n\beta}{r^{n+1}}\right) \frac{1}{3NA r^2} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} = \frac{N}{2} \frac{\partial r}{\partial V} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{m\alpha}{r^{m+1}} - \frac{n\beta}{r^{n+1}}\right) \frac{1}{3NA r^2} \right]$$

体弹性模量 $K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_{V_0} \cdot V_0$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-\frac{m^2\alpha}{r_0^m} + \frac{n^2\beta}{r_0^n} - \frac{m\alpha}{r_0^m} + \frac{n\beta}{r_0^n} \right]$$

由平衡条件 $\left. \frac{\partial U}{\partial V} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \left(\frac{m\alpha}{r_0^{m+1}} - \frac{n\beta}{r_0^{n+1}}\right) \frac{1}{3NA r_0^2} = 0$

$$\frac{m\alpha}{r_0^m} = \frac{n\beta}{r_0^n}$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-\frac{m^2\alpha}{r_0^m} + \frac{n^2\beta}{r_0^n} \right]$$

体弹性模量 $K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_{V_0} \cdot V_0 \quad U_0 = \frac{N}{2} \left(-\frac{\alpha}{r_0^m} + \frac{\beta}{r_0^n}\right)$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-\frac{m^2\alpha}{r_0^m} + \frac{n^2\beta}{r_0^n} \right]$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-m \frac{m\alpha}{r_0^m} + n \frac{n\beta}{r_0^n} \right]$$

$$\left(\frac{m\alpha}{r_0^m} = \frac{n\beta}{r_0^n}\right) = -\frac{N}{2} \frac{nm}{9V_0^2} \left[-\frac{\alpha}{r_0^m} + \frac{\beta}{r_0^n} \right]$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{mn}{9V_0^2} (-U_0) \quad K = |U_0| \frac{mn}{9V_0^2}$$

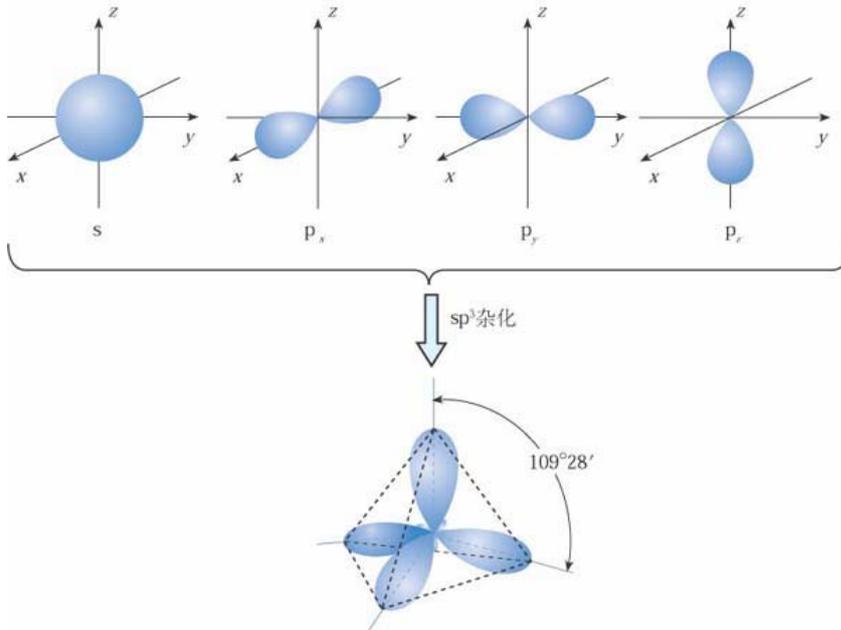
$$4) \quad \frac{m\alpha}{r_0^m} = \frac{n\beta}{r_0^n} \quad r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}} \quad W = \frac{1}{2} \alpha \left(1 - \frac{m}{n} \right) \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{-m}{n-m}}$$

$$\beta = \frac{W}{2} r_0^{10} \quad \beta = 1.18 \times 10^{-95} \text{ eV} \cdot \text{m}^{10}$$

$$\alpha = r_0^2 \left[\frac{\beta}{r_0^{10}} + 2W \right] \quad \alpha = 9.0 \times 10^{-19} \text{ eV} \cdot \text{m}^2$$

2.4 经过 sp^3 杂化后形成的共价键，其方向沿着立方体的四条对角线的方向，求共价键之间的夹角。

解 sp^3 轨道杂化过程形成的共价键如图所示



共价键沿立方体四对角线方向，与中心可构成正四面体，易得键角为 $109^\circ 28'$

2.5 假设 III-V 族化合物中，III 族、V 族原子都是电中性的 ($q^*=0$) 求其电离度 f_i

解 对于 III 族原子，有效电荷 $q^* = 3 - 8 \frac{\lambda^2}{1 + \lambda^2}$ 电中性时 $q^*=0$ ，所以 $\lambda^2 = 3/5$

由 Coulson 定义电离度得 III-V 族化合物 ($q^*=0$) 的电离度为

$$f_i = \frac{p_A - p_B}{p_A + p_B} = \frac{1 - \lambda^2}{1 + \lambda^2} = 0.25$$

2.6. 用林纳德—琼斯(Lennard—Jones)势计算 Ne 在 bcc (球心立方) 和 fcc (面心立方) 结构中的结合能之比值。

$$\text{解 } u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], u(r) = \frac{1}{2} N(4\epsilon) \left[A_n \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - A_l \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

$$\left(\frac{du(r)}{r}\right)_r = 0 \Rightarrow r_0^6 = 2 \frac{A_{12}}{A_6} \sigma^6 \Rightarrow u_0 = -\frac{1}{2} N \varepsilon \frac{A_6^2}{A_{12}}$$

$$\frac{\omega_{bcc}}{\omega_{fcc}} = \left| \frac{u(r_0)_{bcc}}{u(r_0)_{fcc}} \right| = \left(\frac{A_6^2}{A_{12}} \right) / \left(\frac{A_6^2}{A_{12}'} \right) = \frac{12.25^2 / 9.11}{14.45^2 / 12.13} = 0.957$$

2.7. 对于 H_2 ，从气体的测量得到 Lennard—Jones 势参数为 $\varepsilon = 50 \times 10^{-6} J$, $\sigma = 2.96 \text{ \AA}$. 计算 H_2 结合成面心立方固体分子氢时的结合能 (以 kJ/mol 单位), 每个氢分子可当做球形来处理. 结合能的实验值为 0.751 kJ/mol , 试与计算值比较.

解 以 H_2 为基团, 组成 fcc 结构的晶体, 如略去动能, 分子间接 Lennard—Jones 势相互作用, 则晶体的总相互作用能为:

$$U = 2N\varepsilon \left[\sum_i P_{ij}^{-12} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \sum_j P_{ij}^{-6} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right].$$

$$\sum_j P_{ij}^{-6} = 14.45392; \sum_i P_{ij}^{-12} = 12.13188,$$

$$\varepsilon = 50 \times 10^{-16} \text{ erg}, \sigma = 2.96 \text{ \AA}, N = 6.022 \times 10^{23} / \text{mol}.$$

将 R_0 代入 U 得到平衡时的晶体总能量为

$$U = 2 \times 6.022 \times 10^{23} / \text{mol} \times 50 \times 10^{-16} \text{ erg} \times \left[(12.13) \left(\frac{2.96}{3.16} \right)^{12} - (14.45) \left(\frac{2.96}{3.16} \right)^6 \right] \approx -2.55 \text{ kJ/mol}.$$

因此, 计算得到的 H_2 晶体的结合能为 2.55 kJ/mol , 远大于实验观察值 0.751 kJ/mol .

对于 H_2 的晶体, 量子修正是很重要的, 我们计算中没有考虑零点能的量子修正, 这正是造成理论和实验值之间巨大差别的原因.

第三章 习题

3.1. 已知一维单原子链，其中第 j 个格波，在第 n 个格点引起的位移为， $\mu_{nj} = a_j \sin(\omega_j t - naq_j + \delta_j)$ ， δ_j 为任意个相位因子，并已知在较高温度下每个格波的平均能量为 kT ，具体计算每个原子的平方平均位移。

解 任意一个原子的位移是所有格波引起的位移的叠加，即

$$\mu_n = \sum_j \mu_{nj} = \sum_j a_j \sin(\omega_j t + naq_j + \delta_j) \quad (1)$$

$$\overline{\mu_n^2} = \overline{\left(\sum_j \mu_{nj} \right) \left(\sum_{j'} \mu_{nj'}^* \right)} = \sum_j \overline{\mu_{nj}^2} + \sum_{j \neq j'} \overline{\mu_{nj} \cdot \mu_{nj'}^*}$$

由于 $\mu_{nj} \cdot \mu_{nj'}$ 数目非常大为数量级，而且取正或取负几率相等，因此上式得第 2 项与第一项相比是一小量，可以忽略不计。所以 $\overline{\mu_n^2} = \sum_j \overline{\mu_{nj}^2}$

由于 μ_{nj} 是时间 t 的周期性函数，其长时间平均等于一个周期内的时间平均值为

$$\overline{\mu_j^2} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} a_j^2 \sin^2(\omega_j t + naq_j + \delta_j) dt = \frac{1}{2} a_j^2 \quad (2)$$

已知较高温度下的每个格波的能量为 kT ， μ_{nj} 的动能时间平均值为

$$\overline{T_{nj}} = \frac{1}{T_0} \int_0^L dx \int_0^{T_0} \left[\frac{1}{2} \rho \left(\frac{d\mu_{nj}}{dt} \right)^2 \right] dt = \frac{\rho \omega_j^2 a_j^2}{2T_0} L \int_0^{T_0} \sin^2(\omega_j t + naq_j + \delta_j) dt = \frac{1}{4} \rho \omega_j^2 L a_j^2$$

其中 L 是原子链的长度， ρ 是质量密度， T_0 为周期。

$$\text{所以 } \overline{T_{nj}} = \frac{1}{4} \rho \omega_j^2 L a_j^2 = \frac{1}{2} kT \quad (3)$$

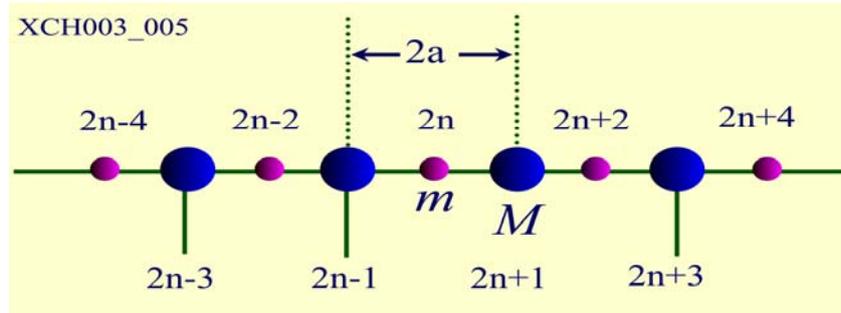
因此 将此式代入 (2) 式有 $\overline{\mu_{nj}^2} = \frac{kT}{PL\omega_j^2}$

所以每个原子的平均位移为 $\overline{\mu_n^2} = \sum_j \overline{\mu_{nj}^2} = \sum_j \frac{kT}{PL\omega_j^2} = \frac{kT}{PL} \sum_j \frac{1}{\omega_j^2}$

3.2 讨论 N 个原胞的一维双原子链(相邻原子间距为 a)，其 $2N$ 个格波解，当 $M=m$ 时与一维单原子链结果一一对应

解 质量为 M 的原子位于 $2n-1, 2n+1, 2n+3, \dots$ 。

质量为 m 的原子位于 $2n, 2n+2, 2n+4, \dots$ 。



牛顿运动方程

$$m\ddot{\mu}_{2n} = -\beta(2\mu_{2n} - \mu_{2n+1} - \mu_{2n-1})$$

$$M\ddot{\mu}_{2n+1} = -\beta(2\mu_{2n+1} - \mu_{2n+2} - \mu_{2n})$$

—— 体系有 N 个原胞，有 $2N$ 个独立的方程

方程

$$m\ddot{\mu}_{2n} = -\beta(2\mu_{2n} - \mu_{2n+1} - \mu_{2n-1})$$

$$M\ddot{\mu}_{2n+1} = -\beta(2\mu_{2n+1} - \mu_{2n+2} - \mu_{2n})$$

的解

$$\mu_{2n} = Ae^{i[\omega t - (2n)aq]}$$

$$\mu_{2n+1} = Be^{i[\omega t - (2n+1)aq]}$$

$$\begin{cases} (2\beta - m\omega^2)A - (2\beta \cos aq)B = 0 \\ -(2\beta \cos aq)A + (2\beta - M\omega^2)B = 0 \end{cases}$$

A, B 有非零解 $\begin{vmatrix} 2\beta - m\omega^2 & -2\beta \cos aq \\ -2\beta \cos aq & 2\beta - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0$

$$\omega^2 = \beta \frac{(m+M)}{mM} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

—— 两种不同的格波的色散关系

$$\omega_+^2 = \beta \frac{(m+M)}{mM} \left\{ 1 + \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

$$\omega_-^2 = \beta \frac{(m+M)}{mM} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

对应一个 q 有两支格波：一支声学波和一支光学波

—— 总的格波数目为 $2N$

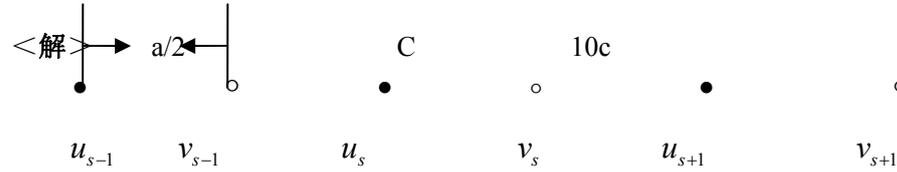
$$M=m \quad \omega_+ = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \cos \frac{aq}{2}$$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \sin \frac{aq}{2}$$

长波极限情况下 $q \rightarrow 0 \quad \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \approx \frac{qa}{2} \quad \omega_- = (2\sqrt{\frac{\beta}{m}})q$

与一维单原子晶格格波的色散关系一致

3.3. 考虑一双原子链的晶格振动，链上最近邻原子间力常数交错的等于 c 和 $10c$ 。令两种原子质量相同，且最近邻间距为 $\frac{a}{2}$ 。求在 $k=0$ 和 $k=\frac{\pi}{a}$ 处的 $\omega(k)$ 。大略地画出色散关系。本题模拟双原子分子晶体，如 H_2 。



$$\left. \begin{aligned} M \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= C(v_{s-1} - u_s) + 10C(v_s - u_s), \\ M \frac{d^2 v_s}{dt^2} &= 10C(u_s - v_s) + C(u_{s+1} - v_s), \end{aligned} \right\}$$

将 $u_s = u e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t}$, $v_s = V e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t}$ 代入上式有

$$\left. \begin{aligned} -M\omega^2 u &= C(10 + e^{-ika})V - 11Cu, \\ -M\omega^2 V &= C(e^{ika} + 10)u - 11CV, \end{aligned} \right\}$$

是 u, v 的线性齐次方程组，存在非零解的条件为

$$\begin{vmatrix} M\omega^2 - 11C, C(10 + e^{-ika}) \\ C(e^{ika} + 10), M\omega^2 - 11C \end{vmatrix} = 0, \text{ 解出}$$

$$M^2 \omega^4 - 22MC\omega^2 + 20C^2(1 - \cos Ka) = 0$$

$$\therefore \omega_{\pm}^2 = \frac{C}{M} \left[11 \pm \sqrt{121 - 20(1 - \cos Ka)} \right].$$

当 $K=0$ 时, 当 $K=\pi/a$ 时

$$\left. \begin{aligned} \omega_+^2 &= 22C/M, \\ \omega_-^2 &= 0, \end{aligned} \right\} \left. \begin{aligned} \omega_+^2 &= 20C/M, \\ \omega_-^2 &= 2C/M, \end{aligned} \right\}$$

ω^2 与 K 的关系如下图所示。这是一个双原子(例如 H_2)晶体

3.5 考虑一个全同离子组成的平面格子，用 U_{lm} 记第 l 行，第 m 列的原子垂直于格平面的位移，每个原子质量为 M ，最近邻原子的里常数为 c

(a) 证明运动方程为

$$M \left(\frac{d^2 u_{l,m}}{dt^2} \right) = c \left[(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{l,m}) + (u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{l,m}) \right]$$

(b) 设解的形式为 $u_{l,m} = u(0) \exp[i(lk_x a + mk_y a - \omega t)]$ 。这里 a 是最近邻原子的间距，证明

运动方程是可以满足的，如果 $\omega^2 M = 2c(2 - \cos k_x a - \cos k_y a)$ 。这就是问题的色散关系

(c) 证明独立解存在的 k 空间区域是一个边长为 $\frac{2\pi}{a}$ 的正方形，这就是平方格子的第 1 布里渊区，构出 $k=k_x$ ，而 $k_y=0$ 时，和 $k_x=k_y$ 时的 $\omega-k$ 图

(d) 对于 $k_a \ll 1$ ，证明 $\omega = \sqrt{\frac{a^2 c}{M}} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \sqrt{\frac{a^2 c}{M}} k$

解 (a) 对于 0 原子 (U_{lm}) 考虑左右上下原子与其相对位移有

$$M\ddot{U}_{lm} = C(U_{lm+1} - U_{lm}) - C(U_{lm} - U_{lm-1}) + C(U_{l+1m} - U_{lm}) - C(U_{lm} - U_{l-1m})$$

$$M\ddot{U}_{lm} = C[(U_{lm+1} + U_{lm-1} - 2U_{lm}) + C(U_{l+1m} + U_{l-1m} - 2U_{lm})]$$

(b) 由题知 $U_{l,m} = U(0)\exp[i(lk_x a + mk_y a - \omega t)]$ 为平面格子运动方程的解，故

$$U_{l+1,m} = U(0)\exp[i((l+1)k_x a + mk_y a - \omega t)]$$

$$U_{l-1,m} = U(0)\exp[i((l-1)k_x a + mk_y a - \omega t)]$$

$$U_{l,m+1} = U(0)\exp[i(lk_x a + (m+1)k_y a - \omega t)]$$

$$U_{l,m-1} = U(0)\exp[i(lk_x a + (m-1)k_y a - \omega t)]$$

将上式代入平面运动方程可得色散关系 $\omega^2 M = 2c(2 - \cos k_x a - \cos k_y a)$

(c) 由色散关系周期性边界条件知道 $k_x \in \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ $k_y \in \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ 故在独立解存在的

k 空间区域为一边长为 $\frac{2\pi}{a}$ 的正方形，即二维方正格子的第一布里渊区。

$k=k_x$ 而 $k_y=0$ 时 $\omega^2 M = 2c(2 - \cos ka)$

$$k_x=k_y \text{ 时 } \omega^2 M = 2c(2 - \cos k_x a) = 2c\left(2 - \cos \frac{ka}{\sqrt{2}}\right)$$

(d) 对于 $k_a \ll 1$ ，由 $\frac{2c}{M}(2 - \cos k_x a)\cos ka = 1 - 2\sin^2 \frac{ka}{2} \approx 1 - \frac{k^2 a^2}{2}$

$$\omega^2 \approx \frac{2c}{M}\left(2 - \left(1 - \frac{k_x^2 a^2}{2}\right) - \left(1 - \frac{k_y^2 a^2}{2}\right)\right) = \frac{2c}{M}(k_x + k_y) \text{ 即 } \omega = \sqrt{\frac{a^2 c}{M}}(k_x + k_y) = \sqrt{\frac{a^2 c}{M}} k$$

3.5 已知某离子晶体每对离子平均相互作用能为 $u(r) = -\frac{\alpha q^2}{r} + \frac{\beta}{r^n}$ 其中马德隆常数

$\alpha = 1.75, n = 9$ ，平衡离子间距 $r_0 = 2.82 \text{ \AA}$ 。

错误！未找到引用源。试求离子在平衡位置附近的振动频率。

错误！未找到引用源。计算与该频率相当的电磁波的波长，并与 NaCl 红外吸收频率的测量值 61μ 进行比较。

解：错误！未找到引用源。把一对 NaCl 离子看成一对谐振子，其振动势能可表示为

$$u_0 = \frac{1}{2} \beta r_0^2 \quad \text{错误！未找到引用源。}$$

其中 β 为力常数。它与振动频率有如下关系

$$\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}} \quad \text{错误！未找到引用源。}$$

其中， $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}$ 错误！未找到引用源。

错误！未找到引用源。式 u_0 左边为每对离子的平均作用能。

因为
$$\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=r_0} = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} - \frac{nc}{r_0^{n+1}} = 0$$

所以
$$\frac{c}{r_0^n} = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \cdot \frac{1}{n} \quad \text{错误！未找到引用源。}$$

$$E_b = |u(r_0)| = + \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = 1.27 \times 10^{-18} \text{ J}$$

由错误！未找到引用源。错误！未找到引用源。错误！未找到引用源。式得

$$\omega = \sqrt{\frac{2}{\mu} \frac{2\mu}{r_0^2}} = \frac{2}{r_0} \sqrt{u \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}$$

把数值代入得

$$\omega = 5.25 \times 10^{13}$$

所以
$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 8.35 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

错误！未找到引用源。 波长
$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8}{8.35 \times 10^{12}} = 3.59 \times 10^{-5} \text{ m} = 36 \mu\text{m}。$$

与吸收频带的关系值 $\lambda = 61 \mu\text{m}$ 很接近。

3.6 计算一维单原子链的频率分布函数 $\rho(\omega)$

解 设单原子链长度 $L = Na$

$$\text{波矢取值 } q = \frac{2\pi}{Na} \times h \quad \text{每个波矢的宽度 } \frac{2\pi}{Na}$$

$$\text{状态密度 } \frac{Na}{2\pi} \quad \text{dq 间隔内的状态数 } \frac{Na}{2\pi} dq$$

—— 对应 $\pm q, \omega$ 取值相同， $d\omega$ 间隔内的状态数目

$$\rho(\omega)d\omega = 2 \times \frac{Na}{2\pi} dq$$

$$\text{一维单原子链色散关系 } \omega^2 = \frac{4\beta}{m} \sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$$

$$\text{令 } \omega_0 = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \quad \omega = \omega_0 \sin\left(\frac{aq}{2}\right)$$

$$\text{两边微分得到 } d\omega = \omega_0 \frac{a}{2} \cos\left(\frac{aq}{2}\right) dq$$

$$\cos\left(\frac{aq}{2}\right) = \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2}} \quad d\omega = \frac{a}{2} \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} dq$$

$$d\omega = \frac{a}{2} \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} dq \quad dq = \frac{2}{a} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$$

$$\text{代入 } \rho(\omega)d\omega = 2 \times \frac{Na}{2\pi} dq = 2 \times \frac{N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}} d\omega$$

$$\text{一维单原子链的频率分布函数 } \rho(\omega) = \frac{2N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$$

3.7. 设三维晶格的光学振动在 $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ 附近的长波极限有 $\omega(q) = \omega_0 - Aq^2$

$$\text{求证：频率分布函数为 } f(\omega) = \frac{V}{4\pi^2} \frac{1}{A^{3/2}} (\omega_0 - \omega)^{1/2}, \omega < \omega_0;$$

$$f(\omega) = 0, \quad \omega > \omega_0$$

解 $\omega > \omega_0$ 时， $\omega - \omega_0 = Aq^2 > 0 \Rightarrow f(\omega) = 0, \omega < \omega_0 \Rightarrow \omega_0 - \omega = Aq^2 \Rightarrow q = A^{-1/2} (\omega_0 - \omega)^{1/2}$

$$\text{依据 } \nabla_{\mathbf{q}} \omega(q) = -2Aq, f(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{s}}{|\nabla_{\mathbf{q}} \omega(q)|}, \text{ 并带入上边结果有}$$

$$f(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{d\mathbf{s}}{|\nabla_{\mathbf{q}} \omega(q)|} = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{2A^2} 4\pi (\omega_0 - \omega) \frac{A^{1/2}}{(\omega_0 - \omega)^{1/2}} = \frac{V}{(2\pi)^2} \cdot \frac{1}{A^{3/2}} (\omega_0 - \omega)^{1/2}$$

$$B \text{ 点能量 } \varepsilon_B = \frac{\hbar^2}{2m}(K_x^2 + K_y^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left[2 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right], \text{ 所以 } \varepsilon_B / \varepsilon_A = 2$$

3.8. 有 N 个相同原子组成的面积为 S 的二维晶格，在德拜近似下计算比热，并论述在低温极限比热正比于 T^2 。

证明：在 k 到 $k + dk$ 间的独立振动模式对应于平面中半径 n 到 $n + dn$ 间圆环的面积

$$2\pi n dn, \text{ 且 } 2\pi n dn = \frac{L^2}{2\pi} k dk = \frac{5}{2\pi} k dk \text{ 即 } \rho(\omega) = \frac{3s\omega}{2\pi v_\rho^2} d\omega \text{ 则}$$

$$E = \frac{3s}{2\pi v_\rho^2} \int_0^{\omega_m} \frac{\hbar \omega^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} + E_0 = \frac{3s(k_B T)^3}{2\pi v_\rho^2 \hbar^2} \int_D \frac{\hbar \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 d\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{3s(k_B T)^3}{2\pi v_\rho^2 \hbar^2} \int_D \frac{x^2 dx}{e^x - 1}$$

$$T \rightarrow 0 \text{ 时, } E \propto T^3, \therefore C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_s \propto T^2$$

3.9. 写出量子谐振子系统的自由能，证明在经典极限下，自由能为

$$F \cong U_0 + k_B T \sum_q \ell_n \left(\frac{\hbar \omega_q}{k_B T} \right)$$

$$\text{证明: 量子谐振子的自由能为 } F = U + k_B T \sum_q \left[\frac{1}{2} \frac{\hbar \omega_q}{k_B T} + \ell_n \left(1 - e^{-\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}} \right) \right]$$

经典极限意味着（温度较高） $k_B T \gg \hbar \omega_q$

应用 $e^x = 1 - x + x^2 + \dots$

$$\text{所以 } e^{-\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}} = 1 - \frac{\hbar \omega_q}{k_B T} + \left(\frac{\hbar \omega_q}{k_B T} \right)^2 + \dots$$

$$\text{因此 } F \cong U + \sum_q \frac{1}{2} \hbar \omega_q + \sum_q k_B T \ell_n \left(1 - 1 + \frac{\hbar \omega_q}{k_B T} \right) \cong U_0 + k_B T \ell_n \left(\frac{\hbar \omega_q}{k_B T} \right)$$

$$\text{其中 } U_0 \cong U + \sum_q \frac{1}{2} \hbar \omega_q$$

3.10. 设晶体中每个振子的零点振动能为 $\frac{1}{2} \hbar \omega$ ，使用德拜模型求晶体的零点振动能。

证明：根据量子力学零点能是谐振子所固有的，与温度无关，故 $T=0K$ 时振动能 E_0 就是各振

动模零点能之和。 $E_0 = \int_0^{\omega_m} E_0(\omega) g(\omega) d\omega$ 将 $E_0(\omega) = \frac{1}{2} \hbar \omega$ 和 $g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \omega^2$ 代入积

$$\text{分有 } E_0 = \frac{3V}{16\pi^2 \bar{v}_s^3} \omega_m^4 = \frac{9}{8} \hbar N \omega_m, \text{ 由于 } \hbar \omega_m = k_B \theta_D \text{ 得 } E_0 = \frac{9}{8} N k_B \theta_D$$

一股晶体德拜温度为 $\sim 10^2 K$ ，可见零点振动能是相当大的，其量值可与温升数百度所需热能相比拟。

3.11. 一维复式格子

$$m = 5 \times 1.67 \times 10^{-24} \text{ g}, \frac{M}{m} = 4, \beta = 1.5 \times 10^4 \text{ N/m (即 } 1.51 \times 10^4 \text{ dyn/cm)},$$

求 (1)，光学波 $\omega_{\max}^0, \omega_{\min}^0$ ，声学波 ω_{\max}^A 。

(2)，相应声子能量是多少电子伏。

(3)，在 300k 时的平均声子数。

(4)，与 ω_{\max}^0 相对应的电磁波波长在什么波段。

$$\text{解 (1), } \omega_{\max}^A = \sqrt{\frac{2\beta}{M}} = \sqrt{\frac{2 \times 1.5 \times 10^4 \text{ dyn/cm}}{4 \times 5 \times 1.67 \times 10^{24}}} = 3.00 \times 10^{13} \text{ s}^{-1},$$

$$\omega_{\max}^o = \sqrt{\frac{2\beta(M+m)}{Mm}} = \sqrt{\frac{2 \times 1.5 \times 10^4 \times (4 \times 5 + 5) \times 1.67 \times 10^{24} \text{ dyn/cm}}{4 \times 5 \times 1.67 \times 10^{24} \times 5 \times 1.67 \times 10^{24}}} = 6.70 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$$

$$\omega_{\min}^A = \sqrt{\frac{2\beta}{m}} = \sqrt{\frac{2 \times 1.5 \times 10^4 \text{ dyn/cm}}{5 \times 1.67 \times 10^{24}}} = 5.99 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$$

$$\hbar \omega_{\max}^A = 6.58 \times 10^{-16} \times 5.99 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} = 1.97 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

$$(2) \hbar \omega_{\max}^o = 6.58 \times 10^{-16} \times 6.70 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} = 4.41 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

$$\hbar \omega_{\min}^o = 6.58 \times 10^{-16} \times 3.00 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} = 3.95 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

$$(3) \overline{n_{\max}^A} = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{\max}^A / k_B T} - 1} = 0.873, \overline{n_{\max}^o} = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{\max}^o / k_B T} - 1} = 0.221$$

$$\overline{n_{\min}^o} = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{\min}^o / k_B T} - 1} = 0.276$$

$$(4) \lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = 28.1 \mu\text{m}$$

第四章 习题

4.1. 根据 $k = \pm \frac{\pi}{a}$ 状态简并微扰结果，求出与 E_- 及 E_+ 相应的波函数 ψ_- 及 ψ_+ 。说明它们都代表驻波，并比较两个电子云分布（即 $|\psi|^2$ ）说明能隙的来源(假设 $V_n = V_n^*$)。

解 令 $k = +\frac{\pi}{a}$, $k' = -\frac{\pi}{a}$, 简并微扰波函数为 $\psi = A\psi_k^0(x) + B\psi_{k'}^0(x)$

$$\begin{cases} [E^0(k) - E]A + V_n^* B = 0 \\ V_n A + [E^0(k') - E]B = 0 \end{cases} \quad \text{取 } E = E_+$$

带入上式，其中 $E_+ = E^0(k) + |V_n|$

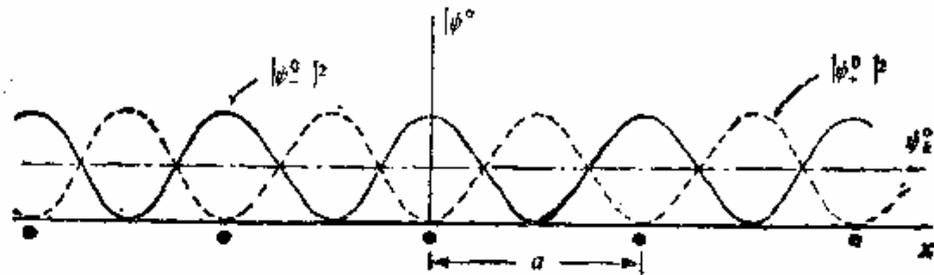
$V(x) < 0, V_n < 0$, 从上式得到 $B = -A$, 于是

$$\psi_+ = A[\psi_k^0(x) - \psi_{k'}^0(x)] = \frac{A}{\sqrt{L}} \left[e^{i\frac{n\pi}{a}x} - e^{-i\frac{n\pi}{a}x} \right] = \frac{2A}{\sqrt{L}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

取 $E = E_-$, $E_- = E^0(k) - |V_n|$ $|V_n|A = -V_n B$, 得到 $A = B$

$$\psi_- = A[\psi_k^0(x) + \psi_{k'}^0(x)] = \frac{A}{\sqrt{L}} \left[e^{i\frac{n\pi}{a}x} + e^{-i\frac{n\pi}{a}x} \right] = \frac{2A}{\sqrt{L}} \cos \frac{n\pi}{a} x$$

由教材可知， Ψ_+ 及 Ψ_- 均为驻波。在驻波状态下，电子的平均速度 $v(k)$ 为零。产生驻波因为电子波矢 $k = \frac{n\pi}{a}$ 时，电子波的波长 $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2a}{n}$ ，恰好满足布拉格发射条件，这时电子波发生全反射，并与反射波形成驻波由于两驻波电子分布不同，所以对应不同代入能量。



例 2 图 ψ_+ 及 ψ_- 的电子云分布

4.2. 写出一维近自由电子近似，第 n 个能带 ($n=1, 2, 3$) 中，简约波数 $k = \frac{\pi}{2a}$ 的 0 级波函数。

$$\text{解: } \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\bar{k}x} e^{i\frac{2\pi}{a}mx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\pi}{2a}x} \cdot e^{i\frac{2\pi}{a}mx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi}{a}(m+\frac{1}{4})x}$$

$$\text{第一能带: } m \cdot \frac{\pi}{2a} = 0, m = 0, \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\pi}{2a}x}$$

$$\text{第二能带: } b = b' \text{ 则 } b' \rightarrow b, m \cdot \frac{2\pi}{a} = -\frac{2\pi}{a}, \text{ 即 } m = -1, (e^{i\frac{2\pi}{a}x} = e^{i\frac{\pi}{2a}x}) \therefore \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{3\pi}{2a}x}$$

$$\text{第三能带: } c' \rightarrow c, m \cdot \frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}, \text{ 即 } m = 1, \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\pi}{2a}x} \cdot e^{i\frac{2\pi}{a}x} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{5\pi}{2a}x}$$

4.3. 电子在周期场中的势能。

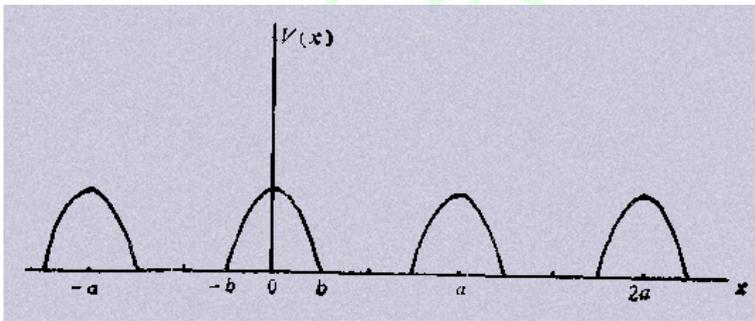
$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 [b^2 - (x-na)^2], & \text{当 } na-b \leq x \leq na+b \\ 0, & \text{当 } (n-1)a+b \leq x \leq na-b \end{cases}$$

其中 $a=4b$, ω 是常数。

(1) 试画出此势能曲线，求其平均值。

(2) 用近自由电子近似模型求出晶体的第一个及第二个带隙宽度。

解: (1) 题设势能曲线如下图所示。



(2) 势能的平均值: 由图可见, $V(x)$ 是个以 a 为周期的周期函数, 所以

$$\bar{V}(x) = \frac{1}{L} \int_L V(x) dx = \frac{1}{a} \int_b^a V(x) dx = \frac{1}{a} \int_{-b}^{a-b} V(x) dx$$

题设 $a = 4b$, 故积分上限应为 $a - b = 3b$, 但由于在 $[b, 3b]$ 区间内 $V(x) = 0$, 故只需

在 $[-b, b]$ 区间内积分. 这时, $n = 0$, 于是

$$\bar{V} = \frac{1}{a} \int_{-b}^b V(x) dx = \frac{m\omega^2}{2a} \int_{-b}^b (b^2 - x^2) dx = \frac{m\omega^2}{2a} \left[b^2 x \Big|_{-b}^b - \frac{1}{3} x^3 \Big|_{-b}^b \right] = \frac{1}{6} m\omega b^2.$$

(3), 势能在 $[-2b, 2b]$ 区间是个偶函数, 可以展开成傅立叶级数

$$V(x) = V_0 + \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_m \cos \frac{m\pi}{2b} x, V_m = \frac{2}{2b} \int_0^{2b} V(x) \cos \frac{m\pi}{2b} x dx = \frac{1}{b} \int_0^b V(x) \cos \frac{m\pi}{2b} x dx$$

第一个禁带宽度 $E_{g_1} = 2|V_1|$, 以 $m=1$ 代入上式, $E_{g_1} = \frac{m\omega^2}{b} \int_0^b (b^2 - x^2) \cos \frac{\pi x}{2b} dx$

利用积分公式 $\int u^2 \cos mu du = \frac{u}{m^2} [(mu \sin mu + 2 \cos mu)] - \frac{2}{m^3} \sin mu$ 得

$E_{g_1} = \frac{16m\omega^2}{\pi^3} b^2$ 第二个禁带宽度 $E_{g_2} = 2|V_2|$, 以 $m=2$ 代入上式, 代入上式

$E_{g_2} = \frac{m\omega^2}{b} \int_0^b (b^2 - x^2) \cos \frac{\pi x}{b} dx$ 再次利用积分公式有 $E_{g_2} = \frac{2m\omega^2}{\pi^2} b^2$

4.4 用紧束缚近似求出面心立方晶格和体心立方晶格 s 态原子能级相对应的能带 $E^s(\vec{k})$ 函数

解 面心立方晶格

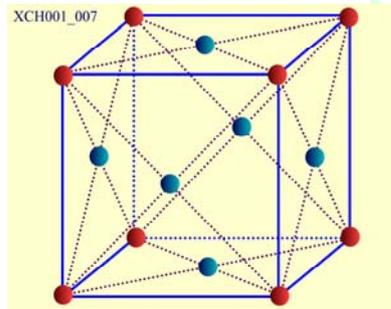
—— s 态原子能级相对应的能带函数 $E^s(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0 - \sum_{R_s = \text{Nearest}} J(R_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$

s 原子态波函数具有球对称性 $J_1 = J(\vec{R}_s) = -\int \varphi_i^{0*}(\vec{\xi} - \vec{R}_s) [U(\vec{\xi}) - V(\vec{\xi})] \varphi_i^0(\vec{\xi}) d\vec{\xi} > 0$

$$E^s(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0 - J_1 \sum_{R_s = \text{Nearest}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

—— 任选取一个格点为原点

—— 最近邻格点有 12 个



12 个最邻近格点的位置

$$\begin{pmatrix} \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 \\ \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & 0 \\ -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 \\ -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0, & \frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ 0, & \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \\ 0, & -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ 0, & -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{a}{2}, & 0, & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2}, & 0, & -\frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & 0, & \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & 0, & -\frac{a}{2} \end{pmatrix}$$

$$\bar{R}_s = \frac{a}{2}\bar{i} + \frac{a}{2}\bar{j} + 0\bar{k} \quad E^s(\bar{k}) = \varepsilon_s - J_0 - J_1 \sum_{R_s = \text{Nearest}} e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}_s}$$

$$e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}_s} = e^{-i(k_x\bar{i} + k_y\bar{j} + k_z\bar{k}) \cdot (\frac{a}{2}\bar{i} + \frac{a}{2}\bar{j} + 0\bar{k})}$$

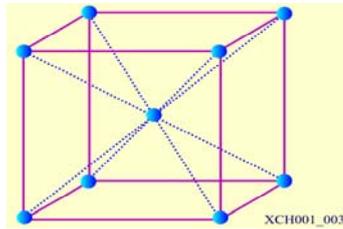
$$e^{-i\frac{a}{2}(k_x + k_y)} = \left(\cos \frac{k_x a}{2} - i \sin \frac{k_x a}{2}\right) \left(\cos \frac{k_y a}{2} - i \sin \frac{k_y a}{2}\right)$$

—— 类似的表示共有 12 项

—— 归并化简后得到面心立方 s 态原子能级相对应的能带

$$E^s(\bar{k}) = \varepsilon_s - J_0$$

$$-4J_1 \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right)$$



对于体心立方格子

—— 任选取一个格点为原点

—— 有 8 个最邻近格点

—— 最近邻格点的位置

$$\left\{ \begin{array}{ccc} \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \end{array} \right\}$$

$$\bar{R}_s = \frac{a}{2}\bar{i} + \frac{a}{2}\bar{j} + \frac{a}{2}\bar{k} \quad E^s(\bar{k}) = \varepsilon_s - J_0 - J_1 \sum_{R_s = \text{Nearest}} e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}_s}$$

$$e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}_s} = e^{-i(k_x\bar{i} + k_y\bar{j} + k_z\bar{k}) \cdot (\frac{a}{2}\bar{i} + \frac{a}{2}\bar{j} + \frac{a}{2}\bar{k})} = e^{-i\frac{a}{2}(k_x + k_y + k_z)}$$

$$= \left(\cos \frac{k_x a}{2} - i \sin \frac{k_x a}{2}\right) \left(\cos \frac{k_y a}{2} - i \sin \frac{k_y a}{2}\right) \left(\cos \frac{k_z a}{2} - i \sin \frac{k_z a}{2}\right)$$

—— 类似的表示共有 8 项

归并化简后得到体心立方 s 态原子能级相对应的能带

$$E^s(\bar{k}) = \varepsilon_s - J_0 - 8J_1 \cos(k_x a / 2) \cos(k_y a / 2) \cos(k_z a / 2)$$

4.5 用 $|n\rangle$ 表示一维晶格的第 n 个格点的 s 态，在只计入近邻作用的紧束缚近似下，写出矩阵元 $\langle m|H|n\rangle$ 的表达式

解 对于 N 个原子组成的相同一维晶格，第 n 个原子的位矢为 \vec{x}_n ，当作为孤立原子时，其 s 态电子的球对称性势能函数为 $u(\vec{x} - \vec{x}_n)$ ，设归一化的波函数为 $\phi(\vec{x} - \vec{x}_n)$ ，能量为 $E^{(0)}$ ，在晶格中该电子的势能函数为 $v(\vec{x})$ ，电子态是 N 度简并的，考虑微扰后的零级近似波函数为 $\psi_k(\vec{x}) = \sum_n C_{n\vec{k}} \phi(\vec{x} - \vec{x}_n)$ 其中 $C_{n\vec{k}}$ 与 $n\vec{k}$ 有关不是 \vec{x} 的函数，根据 Bloch 定理，波函数可以写成 $\psi_k(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_n} \sum_n e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_n)} \phi(\vec{x} - \vec{x}_n) = \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_n} \phi(\vec{x} - \vec{x}_n)$ 即 $C_{n\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_n}$

薛定谔方程为 $\hat{H}\psi_k(\vec{x} - \vec{x}_n) = E\psi_k(\vec{x})$

$$\text{其中 } \hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u(\vec{x} - \vec{x}_n) \right] + [v(\vec{r}) - u(\vec{x} - \vec{x}_n)] = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

其中 $v(\vec{r}) - u(\vec{x} - \vec{x}_n) = \hat{H}'$ 为微扰项，在 \vec{x}_n 附近 \hat{H}' 非常小，而在离 \vec{x}_n 较远处， $\phi(\vec{x} - \vec{x}_n)$ 又

非常小，所求能量的一级近似为 $E = \frac{\int \psi_k^*(\vec{x}) \hat{H} \psi_k(\vec{x}) d\tau}{\int \psi_k^*(\vec{x}) \psi_k(\vec{x}) d\tau}$ 所求矩阵元

$$\begin{aligned} \langle m | H | n \rangle &= \int \psi_k^*(\vec{x}) \hat{H} \psi_k(\vec{x}) d\tau \\ &= \int \psi_k^*(\vec{x}) (\hat{H}_0 + \hat{H}') \psi_k(\vec{x}) d\tau \\ &= \int \psi_k^*(\vec{x}) \sum_n (\hat{H}_0 + \hat{H}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_n} \phi(\vec{x} - \vec{x}_n) d\tau \\ &= E^{(0)} \int \psi_k^*(\vec{x}) \psi_k(\vec{x}) d\tau + \int \sum_m e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_m} \phi(\vec{x} - \vec{x}_m) \sum_n \hat{H}' e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_n} \phi(\vec{x} - \vec{x}_n) d\tau \\ &= NE^{(0)} + \sum_m \sum_n e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_n - \vec{x}_m)} \int \phi^*(\vec{x} - \vec{x}_m) \hat{H}' \phi(\vec{x} - \vec{x}_n) d\tau \\ &= NE^{(0)} + N \sum_n e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_n - \vec{x}_m)} \int \phi^*(\vec{x} - \vec{x}_m) \hat{H}' \phi(\vec{x} - \vec{x}_n) d\tau \end{aligned}$$

4.6 由相同原子组成的一维原子链，每个原胞中有两个原子，原胞长度为 a ，原胞内有两个原子相对距离为 b

- (1) 根据紧束缚近似，值计入近邻相互作用，写出 s 态对应的晶体波函数形式
- (2) 求出相应的 $E(k)$ 函数

解 (1) 单原子紧束缚态的波函数 $\psi_{\vec{k}}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} \exp[i\vec{k} \cdot R_m] \varphi_i(r - R_m)$ 变为

$$\psi_{\vec{k}}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} \sum_d \exp[i\vec{k} \cdot (R_m + d)] \varphi_i(r - R_m - d)$$

其中 d 可以去 0 和 b 两个值，分别表示原胞中两个原子的位置，用 a, b 表示之

$$\psi_{\vec{k}}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} \exp[i\vec{k} \cdot R_m] \varphi_i(r - R_m) + \exp[i\vec{k} \cdot (na + b)] \varphi_i(r - R_m - b)$$

(2) 相应的能带函数为

$$E(k) = \varepsilon_i - J_0(0) - \sum_n J(na - a + b) \exp[ik(na - a + b)] + J(na + b) \exp[ik(na + b)]$$

S 态波函数是球对称的，交叠积分相同，趣味，同时由于 s 态波函数具有宇称， $J_1 > 0$

$$E(k) = \varepsilon_i - J_0(0) - J_1 \{ \exp[ik(na - a + b)] + \exp[ik(na + b)] \}$$

$$E(k) = \varepsilon_i - J_0(0) - J_1 \exp\left[ik \left(\frac{2n-1}{2} a + b \right) \right] \exp\left[-ik \frac{a}{2} \right] + \exp\left[-ik \frac{a}{2} \right]$$

$$E(k) = \varepsilon_i - J_0(0) - 2J_1 \exp\left[ik \left(\frac{2n-1}{2} a + b \right) \right] \cos\left[-ik \frac{a}{2} \right]$$

4.7. 有一一维单原子链，间距为 a ，总长度为 Na 。

(1) 用紧束缚近似求出原子 s 态能级对应的能带 $E(k)$ 函数。

(2) 求出其能态密度函数的表达式。

(3) 如果每个原子 s 态只有一个电子，求等于 $T=0K$ 的费米能级 E_F^0 及 E_F^0 处的能态密度。

解：(1), $E(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0 - J_1(e^{ika} + e^{-ika}) = \varepsilon_s - J_0 - 2J_1 \cos ka = E_0 - 2J_1 \cos ka$

$$\left[E(\vec{k}) = E - J_0 - \sum J(p_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s} \right]$$

$$(2), N(E) = 2 \times \frac{L}{2\pi} \times 2 \left| \frac{dk}{dE} \right| = \frac{2Na}{\pi} \times \frac{1}{2J_1 a \sin ka} = \frac{N}{\pi J_1 \sin ka}$$

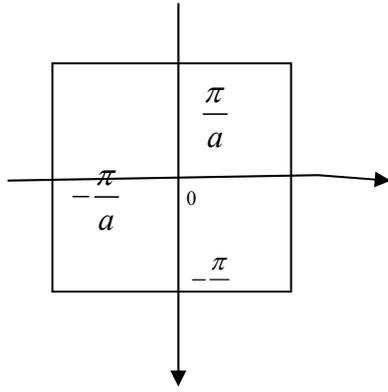
$$(3), N = \int_0^{k_F^0} 2\rho(\vec{k}) \cdot 2dk = 2 \cdot \frac{Na}{2\pi} \cdot 2k_F^0 = \frac{2Nak_F^0}{\pi} \therefore k_F^0 = \frac{\pi}{2a}$$

$$E_F^0 = E(k_F^0) = E - 2J_1 \cos \frac{\pi}{2a} \cdot a = E_s, N(E_F^0) = \frac{N}{\pi J_1 \sin \frac{\pi}{2a} \cdot a} = \frac{N}{\pi J_1}$$

4.8 (1) 证明一个自由简单晶格在第一布里渊区顶角上的一个自由电子动能比该区一边中点大 2 倍。(2) 对于一个简单立方晶格在第一布里渊区顶角上的一个自由电子动能比该区面心上大多少？(3) (2) 的结果对于二价金属的电导率可能会产生什么影响？

解 (1) 二维简单正方晶格的晶格常数为 a ，倒格子晶格基矢 $A = \frac{2\pi}{a} \hat{i}, B = \frac{2\pi}{a} \hat{j}$

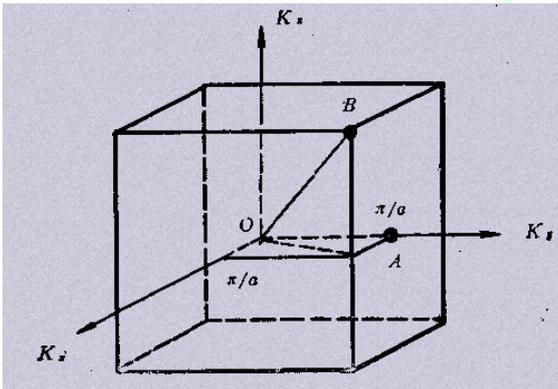
第一布里渊区如图所示



区边中点的波矢为 $K_A = \frac{\pi}{a} \hat{i}$, 角顶 B 点的波矢为 $K_B = \left(\frac{\pi}{a}\right) \hat{i} + \left(\frac{\pi}{a}\right) \hat{j}$.

自由电子能量 $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$,

$$A \text{ 点能量 } \varepsilon_A = \frac{\hbar^2}{2m} K_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2,$$



$$A \text{ 点能量 } \varepsilon_A = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2;$$

$$B \text{ 点能量 } \varepsilon_B = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left[3 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right],$$

所以 $\varepsilon_B / \varepsilon_A = 3$

(3) 如果二价金属具有简单立方品格结构，布里渊区如图 7—2 所示。根据自由电子理论，自由电子的能量为 $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$ ，Fermi 面应为球面。由(2)可知，内

切于 4 点的内切球的体积 $\frac{4\pi}{3} \left(\frac{\pi}{a}\right)^3$ ，于是在 K 空间中，内切球内能容纳的电子数为

$$\frac{4\pi}{3} \left(\frac{\pi}{a}\right)^3 \cdot 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} = \frac{\pi}{3} N = 1.047N \quad \text{其中 } V = Na^3$$

二价金属每个原子可以提供 2 个自由电子，内切球内只能装下每原子 1.047 个电子，余下的 0.953 个电子可填入其它状态中。如果布里渊区边界上存在大的能量间隙，则余下的电子只能填满第一区内余下的所有状态(包括 B 点)。这样，晶体将只有绝缘体性质。然而由(b)可知，B 点的能比 A 点高很多，从能量上看，这种电子排列是不利的。事实上，对于二价金属，布里渊区边界上的能隙很小，对于三维晶体，可出现一区、二区能带重迭。这样，处于第一区角顶附近的高能态的电子可以“流向”第二区中的能量较低的状态，并形成横跨一、二区的球形 Fermi 面。因此，一区中有空态存在，而二区中有电子存在，从而具有导电功能。实际上，多数的二价金属具有六角密堆和面心立方结构，能带出现重迭，所以可以导电。

4.9 半金属交叠的能带

$$E_1(k) = E_1(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}, \quad m_1 = 0.18m$$

$$E_2(k) = E_2(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_2} (\bar{k} - \bar{k}_0)^2, \quad m_2 = 0.06m$$

其中 $E_1(0)$ 为能带 1 的带顶， $E_2(k_0)$ 为能带 2 的带底 $E_1(0) - E_2(k_0) = 0.1 eV$

由于能带的交叠，能带 1 中的部分电子转移到能带 2 中，而在能带 1 中形成空穴，讨论 $T=0K$ 的费密能级

解 半金属的能带 1 和能带 2

$$E_1(k) = E_1(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}$$

$$E_2(k) = E_2(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_2} (\bar{k} - \bar{k}_0)^2$$

能带 1 的能态密度

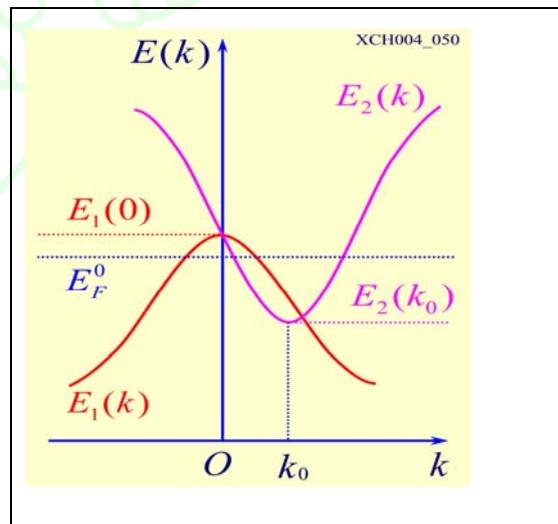
$$N_1(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|}$$

$$|\nabla_k E| = \frac{\hbar^2 k}{m_1}$$

$$|\nabla_k E| = \hbar \sqrt{2[E_1(0) - E_1(k)]/m_1}$$

$$N_1(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k^2}{\hbar \sqrt{2[E_1(0) - E_1(k)]/m_1}}$$

$$N_1(E) = \frac{2V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_1}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_1(0) - E_1(k)}$$



$$N_1(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|}$$

—— 同理能带 2 的能态密度

$$N_2(E) = \frac{2V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_2(k) - E_2(k_0)}$$

如果不发生能带重合，电子刚好填满一个能带

由于能带交叠，能带 1 中的电子填充到能带 2 中，满足

$$\int_{E_F^0}^{E_1(0)} N_1(E) dE = \int_{E_2(k_0)}^{E_F^0} N_2(E) dE$$

$$\int_{E_F^0}^{E_1(0)} \frac{2V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_1}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_1(0) - E_1(k)} dE = \int_{E_2(k_0)}^{E_F^0} \frac{2V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_2(k) - E_2(k_0)} dE$$

$$-m_1^{3/2} [E_1(0) - E_1(k)]^{3/2} \Big|_{E_F^0}^{E_1(0)} = m_2^{3/2} [E_2(k) - E_2(k_0)]^{3/2} \Big|_{E_2(k_0)}^{E_F^0}$$

$$m_1 [E_1(0) - E_F^0] = m_2 [E_F^0 - E_2(k_0)]$$

$$E_F^0 = \frac{m_1 E_1(0) + m_2 E_2(k_0)}{m_1 + m_2} \quad m_1 = 0.18 m, \quad m_2 = 0.06 m \quad E_1(0) - E_2(k_0) = 0.1 eV$$

$$E_F^0 = E_2(k_0) + 0.075 eV$$

4.10 向铜中掺锌，一些铜原子将被锌原子所取代，采用自由电子模型，求锌原子与铜原子之比为什么值是，费米球与第一布里渊区边界相接触？（铜是面心立方晶格，单价，锌是二价）

解 设锌原子个数与总原子个数之比为 m ，则有 $2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \times \frac{4\pi}{3} k_F^3 = N$

$$k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} = 3\pi^2 \frac{4 + 4m}{a^3}$$

面心立方倒格子为体心立方，格常数为 $4\pi/a$ ，[111] 方向

$$k_{\min} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}$$

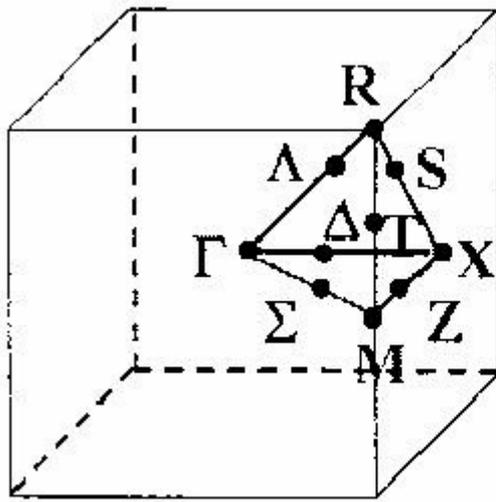
$$\text{相切时有 } k_F = k_{\min}, \quad m = \frac{\sqrt{3}}{4} \pi - 1$$

$$\text{所以锌原子与铜原子之比为 } \frac{m}{1-m} = \frac{\sqrt{3}\pi - 4}{\sqrt{3}\pi + 8}$$

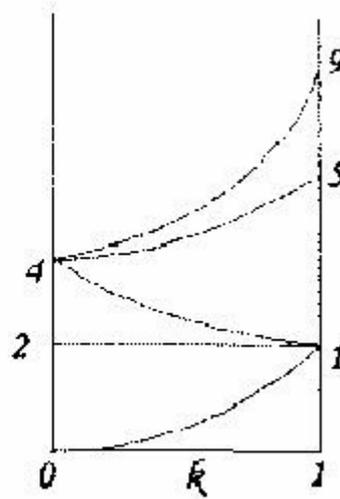
4.11 三维简单立方晶格，立方原胞变成为 \mathbf{a} ，试用简约布里渊区表示自由电子能量，定性画出沿 ΓX 轴与留个近邻倒格点相对应的自由电子 $E(\mathbf{k})$ 函数

解 简单立方晶格的晶格常数为 \mathbf{a} ，倒格子基矢为 $A = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{i}$ ， $B = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{j}$ ， $C = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{k}$ 倒

格子仍然是简单立方格子，如下图



第一布里渊区



自由电子 $E(k)$ 函数

自由电子能量为 $E^{(0)}(k') = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}$ ， k' 为广延波矢，不一定在简约区中，但一定可以找到位

移的一个倒格矢 $\vec{G}_{n'}$ ，使得 $\vec{k} = \vec{k}' - \vec{G}_{n'}$ ， \vec{k} 是简约波矢，则

$$E_n^{(0)}(\vec{k}') = E_n^{(0)}(\vec{k} + \vec{G}_{n'}) = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}_{n'}|^2$$

$$\text{对于三维简单立方格子 } E_n^{(0)}(k) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(k_x + \frac{2\pi}{a} n_x \right)^2 + \left(k_y + \frac{2\pi}{a} n_y \right)^2 + \left(k_z + \frac{2\pi}{a} n_z \right)^2 \right]$$

k 为简约波矢，为简单起见，去 k 的单位为 π/a ， $E_n^{(0)}(k)$ 的单位是 $\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2$

则 $E_n^{(0)}(k) = (k_x + 2n_x)^2 + (k_y + 2n_y)^2 + (k_z + 2n_z)^2$ 对于 ΓX 方向 $k_x = k_x$ ， $k_y = k_z = 0$ 且取

$$0 < k_x < 1 \text{ 内讨论，则 } E_n^{(0)}(k) = (k_x + 2n_x)^2 + 4n_y^2 + 4n_z^2$$

所以 $\Gamma(0,0,0)E^{(0)}(0,0,0) = k_x^2$ ，单简并

六个近邻倒格点的自由电子 $E(k)$ 函数

$$\Gamma(-1,0,0)E^{(0)}(-1,0,0) = (k_x - 2)^2，\text{单简并}$$

$$\Gamma(0,1,0)E^{(0)}(0,1,0) = k_x^2 + 4，\text{四重简并}$$

$$\Gamma(1,0,0)E^{(0)}(1,0,0) = (k_x + 2)^2，\text{单简并}$$

4.12. 设有二维正方晶格，晶体势为 $U(x, y) = -4U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$.

用近自由电子近似的微扰论，近似求出布里渊区顶角 $\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ 处的能隙。

解：以 \hat{i}, \hat{j} 表示位置矢量的单位矢量，以 \hat{b}_1, \hat{b}_2 表示倒易矢量的单位矢量，则有，

$$r = x\hat{i} + y\hat{j}, G = G_1\hat{b}_1 + G_2\hat{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(g_1\hat{b}_1 + g_2\hat{b}_2), g_1, g_2 \text{ 为整数。}$$

$$\text{晶体势能 } U(x, y) = -4U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right).$$

$$U(r) = -U \left(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x} \right) \left(e^{i\frac{2\pi}{a}y} + e^{-i\frac{2\pi}{a}y} \right) \sum_{G(11)} U_{G(11)} e^{iG(11)r}$$

其中 $U_{G(11)} = -U$ ，而其他势能傅氏系数 $U_{G(10)} = U_{G(20)} = \dots = 0$ 。这样基本方程

$$(\lambda_k - \varepsilon)C(K) + \sum_G U_G C(K - G) = 0 \text{ 变为}$$

$$(\lambda_k - \varepsilon)C(K) + U_{G(11)}C(K - G_{(11)}) + U_{G(\bar{1}\bar{1})}C(K - G_{(\bar{1}\bar{1})}) + U_{G(1\bar{1})}C(K - G_{(1\bar{1})}) + U_{G(\bar{1}1)}C(K - G_{(\bar{1}1)}) = 0$$

求布里渊区角顶 $\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ ，即 $k = G\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}G(11)$ 处的能隙，可利用双项平面波近

似

$$\Psi = C(K)e^{iKr} + C(K - G)e^{i(K-G)r} \text{ 来处理。}$$

当 $K = \frac{1}{2}G(11), K = -\frac{1}{2}G(11)$ 时依次有

$$K - G(11) = -\frac{1}{2}G(11), K - G(\bar{1}\bar{1}) = +\frac{1}{2}G(11) \text{ 而其他的 } |K - G(1\bar{1})|,$$

$|K - G(\bar{1}1)| > |G(11)|$ ，所以在双项平面波近似下上式中只有

$$C\left(\frac{1}{2}G(11)\right), C(K - G(11)) = C\left(-\frac{1}{2}G(11)\right);$$

$$C\left(\frac{1}{2}G(11)\right), C(K - G(\bar{1}\bar{1})) = C\left(+\frac{1}{2}G(11)\right);$$

$$\left. \begin{aligned} \left(\lambda_{\frac{1}{2}G(11)} - \varepsilon\right)C\left(\frac{1}{2}G(11)\right) - UC\left(-\frac{1}{2}G(11)\right) &= 0 \\ \left(\lambda_{\frac{1}{2}G(11)} - \varepsilon\right)C\left(-\frac{1}{2}G(11)\right) - UC\left(+\frac{1}{2}G(11)\right) &= 0 \end{aligned} \right\}$$

$$\begin{vmatrix} \lambda - \varepsilon & -u \\ -\frac{1}{2}G(11) & \lambda - \varepsilon \\ -u & -\frac{1}{2}G(11) \end{vmatrix} = 0, \text{ 因为}$$

$$\lambda_{\frac{1}{2}G(11)} = \lambda_{-\frac{1}{2}G(11)} = \lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{2}G(11) \right]^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$

$$\text{由行列式有} (\lambda - \varepsilon)^2 - U^2 = 0 \text{ 解得 } \varepsilon = \lambda \pm U = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \pm U,$$

$$\text{所以在 } \left(\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a} \right) \text{ 处的能隙为 } \Delta\varepsilon = \varepsilon_+ - \varepsilon_- = 2u.$$

$$2) \text{ 简单立方晶格的晶格常数为 } a, \text{ 倒格子基矢为 } A = \left(\frac{2\pi}{a} \right) \hat{i}, B = \left(\frac{2\pi}{a} \right) \hat{j}, C = \left(\frac{2\pi}{a} \right) \hat{k},$$

第一布里渊区如图7—2所示。

4.13 证明面心立方晶体的 s 带紧束近似下的 $E(k)$ 函数，在沿着布里渊区几个住对此轴防线，可以约化成以下形式

$$(1): \text{ 沿 } \Gamma X \text{ 方向 } \left(k_x = \frac{2\pi}{a} \mu, k_y = k_z = 0, 0 \leq \mu \leq 1 \right)$$

$$E_s = \varepsilon_s - \beta - 4\gamma (1 + 2 \cos \mu\pi)$$

$$(2): \text{ 沿 } \Gamma L \text{ 方向, } \left(k_x = \frac{2\pi}{a} \mu = k_y = k_z, 0 \leq \mu \leq 1/2 \right)$$

$$E_s = \varepsilon_s - \beta - 12\gamma \cos^2 \mu\pi$$

$$(3): \text{ 沿 } \Gamma K \text{ 方向, } \left(k_x = \frac{2\pi}{a} \mu = k_y, k_z = 0, 0 \leq \mu \leq 3/4 \right)$$

$$E_s = \varepsilon_s - \beta - 4\gamma (\cos^2 \mu\pi + 2 \cos \mu\pi)$$

$$(4): \text{ 沿 } \Gamma W \text{ 方向, } \left(k_x = \frac{2\pi}{a} \mu, k_z = 0, k_y = \frac{1}{2} \mu \frac{2\pi}{a}, 0 \leq \mu \leq 1 \right)$$

$$E_s = \varepsilon_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \mu\pi \cos \frac{\mu\pi}{2} + \cos \mu\pi + \cos \frac{\mu\pi}{2} \right)$$

解：面心立方点阵最紧邻近似下 S 的电子紧束缚近似能带为

$$\varepsilon(k) = E_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_y a + \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_z a + \cos \frac{1}{2} k_y a \cos \frac{1}{2} k_z a \right)$$

$$(1): \text{ 沿 } \Gamma X \text{ 方向, 将 } k_x = \frac{2\pi}{a} \mu, k_y = k_z = 0, \text{ 代入 (1) 得:}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon(k) &= E_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_y a + \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_z a + \cos \frac{1}{2} k_y a \cos \frac{1}{2} k_z a \right) \\ &= E_s - \beta - 4\gamma (1 + 2 \cos \mu\pi)\end{aligned}$$

(2): 沿 ΓL 方向, 将 $k_x = \frac{2\pi}{a} \mu = K_y = K_z$, 代入 (1) 得:

$$\begin{aligned}\varepsilon(k) &= E_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_y a + \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_z a + \cos \frac{1}{2} k_y a \cos \frac{1}{2} k_z a \right) \\ &= E_s - \beta - 12\gamma \cos^2 \mu\pi\end{aligned}$$

(3): 沿 ΓK 方向, 将 $k_x = \frac{2\pi}{a} \mu = k_y$, $k_z=0$ 代入 (1) 得:

$$\begin{aligned}\varepsilon(k) &= E_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_y a + \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_z a + \cos \frac{1}{2} k_y a \cos \frac{1}{2} k_z a \right) \\ &= E_s - \beta - 4\gamma (\cos^2 \mu\pi + 2 \cos \mu\pi)\end{aligned}$$

(4): 沿 ΓW 方向, 将 $k_x = \frac{2\pi}{a} \mu$, $k_z = 0$, $k_y = \frac{1}{2} \mu \frac{2\pi}{a}$ 代入 (1) 得:

$$\begin{aligned}\varepsilon(k) &= E_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_y a + \cos \frac{1}{2} k_x a \cos \frac{1}{2} k_z a + \cos \frac{1}{2} k_y a \cos \frac{1}{2} k_z a \right) \\ &= E_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \mu\pi \cos \frac{\mu\pi}{2} + \cos \mu\pi + \cos \frac{\mu\pi}{2} \right)\end{aligned}$$

第五章 习题

5.1 设一维晶体的电子能带可以写成 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

其中 a 为晶格常数，计算

- 1) 能带的宽度
- 2) 电子在波矢 k 的状态时的速度
- 3) 能带底部和能带顶部电子的有效质量

解 1) 能带的宽度的计算 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

$$\text{能带底部 } k=0 \quad E(0) = 0$$

$$\text{能带顶部 } k = \frac{\pi}{a} \quad E\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$$

$$\text{能带宽度 } \Delta E = E\left(\frac{\pi}{a}\right) - E(0) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$$

2) 电子在波矢 k 的状态时的速度

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$$

$$\text{电子的速度 } v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$$

$$v(k) = \frac{\hbar}{ma} (\sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka)$$

3) 能带底部和能带顶部电子的有效质量 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

$$\text{电子的有效质量 } m^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{m}{\cos ka - (1/2) \cos 2ka}$$

$$\text{能带底部 } k=0 \quad \text{有效质量 } m^* = 2m$$

$$\text{能带顶部 } k = \frac{\pi}{a} \quad \text{有效质量 } m^* = -\frac{2}{3}m$$

5.2 晶格常数为 2.5 \AA 的一维晶格，当外加 10^2 V/m 和 10^7 V/m 电场是，试分别估算电子自能带底运动到能带顶所需要的时间

解 对晶体施加压力电场，电子在电场作用下不断改变状态，表现为电子在 \vec{k} 空间的运动，

有晶体中电子运动的准经典运动方程 $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = e\vec{E}$

则电子在 \vec{k} 空间的速度 $\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e\vec{E}}{\hbar}$

顶与带底相距 $\frac{\pi}{a}$ 故所需时间 $t = \frac{\frac{\pi}{a}}{\frac{e\vec{E}}{\hbar}} = \frac{\hbar\pi}{ae\vec{E}}$

$$E_1 = 10^2 V/m \text{ 时 } t = 8.3 \times 10^{-8} s$$

$$E_2 = 10^7 V/m \text{ 时 } t = 8.3 \times 10^{-13} s$$

5.3 试证在磁场中运动的布拉格电子，在 k 空间中轨迹面积 S_n 和在 r 空间的轨迹面积 A_n 之

间的关系为 $A_n = \left(\frac{\hbar c}{qB}\right)^2 S_n$

解 电子在磁场中运动受到洛伦兹力作用，有晶体运动准经典运动方程

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e \frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{B}) = -e \frac{1}{c} \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B} \right)$$

对 t 积分 $\hbar c \vec{k} = -e \vec{r} \times \vec{B}$

在垂直于 B 的平面内 $\Delta r = \frac{\hbar c}{eB} \Delta \vec{k}$

所以，电子在 k 空间中的轨道面积和 r 空间中的轨道面积之间有 $A_n = \left(\frac{\hbar c}{qB}\right)^2 S_n$

5.4 (1) 根据自由电子模型计算钾的德.哈斯-范.阿尔芬效应的周期 $\Delta\left(\frac{1}{B}\right)$

(2) 对于 $B \parallel T$ ，在其实空间中电子运动轨迹的面积有多大？

解 (1) $\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi q}{\hbar S_F} \quad S_F = 2\pi^2 \frac{N}{L^2}$

二维自由电子气费米圆的面积 $S_F = \pi k_F^2$

三维 k 空间形成一系列圆柱面，每当有一个圆柱面恰好与费米球相切是，系统能量增量最大，

使得带隙系统能量增量 ΔE 随着 $1/B$ 呈现周期变化，周期取决于最大截面 S_F ，钾的

$$S_F = \pi k_F^2 = \pi \left(0.602 \times \frac{2\pi}{q} \right)^2 \quad \Delta \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{1.602 \times 2\pi \times 10^{-19}}{1.055 \times \left(0.602 \times \frac{2\pi}{a} \right)^2 \times 10^{-34} \pi}$$

a 为体心立方晶胞的边长

$$(2) \quad B = 1T \quad S_F = \frac{2\pi q}{\hbar} = 90536 \times 10^{15} m^{-2}$$

$$\text{在真空空间中电子运动轨迹的面积 } S = \pi \left(\frac{2\pi}{k_F} \right)^2 = \frac{4\pi^2}{S_F} = 4.08 \times 10^{-14} m^2$$

$$5.5 \quad \text{设电子等能面为椭球 } E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$$

外加磁场 \mathbf{B} 相对于椭球主轴方向余弦为 α, β, γ

1) 写出电子的准经典运动方程

$$2) \quad \text{证明电子绕磁场回转频率为 } \omega = \frac{qB}{m^*}. \quad \text{其中 } m^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}}$$

$$\text{解} \quad \text{恒定磁场中电子运动的基本方程 } \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}$$

$$\text{电子的速度 } \vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

$$\text{电子能量 } E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$$

$$\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \frac{\partial E}{\partial k_1} \hat{k}_1 + \frac{\partial E}{\partial k_2} \hat{k}_2 + \frac{\partial E}{\partial k_3} \hat{k}_3$$

$$\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{\hbar^2 k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{\hbar^2 k_3}{m_3} \hat{k}_3$$

$$\text{电子的速度 } \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{\hbar k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{\hbar k_3}{m_3} \hat{k}_3$$

$$\text{磁感应强度 } \vec{B} = B(\hat{k}_1 \alpha + \hat{k}_2 \beta + \hat{k}_3 \gamma)$$

$$\text{电子运动方程 } \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}$$

$$\text{应用关系 } \hat{k}_1 \times \hat{k}_2 = \hat{k}_3$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -qB \left[\left(\frac{k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{k_3}{m_3} \hat{k}_3 \right) \times (\hat{k}_1 \alpha + \hat{k}_2 \beta + \hat{k}_3 \gamma) \right]$$

—— 电子运动方程

$$\begin{cases} \frac{dk_1}{dt} = -qB \left(\frac{k_2}{m_2} \gamma - \frac{k_3}{m_3} \beta \right) \\ \frac{dk_2}{dt} = -qB \left(\frac{k_3}{m_3} \alpha - \frac{k_1}{m_1} \gamma \right) \\ \frac{dk_3}{dt} = -qB \left(\frac{k_1}{m_1} \beta - \frac{k_2}{m_2} \alpha \right) \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{dk_1}{dt} + qB \left(\frac{k_2}{m_2} \gamma - \frac{k_3}{m_3} \beta \right) = 0 \\ \frac{dk_2}{dt} + qB \left(\frac{k_3}{m_3} \alpha - \frac{k_1}{m_1} \gamma \right) = 0 \\ \frac{dk_3}{dt} + qB \left(\frac{k_1}{m_1} \beta - \frac{k_2}{m_2} \alpha \right) = 0 \end{cases}$$

$$\text{令 } k_1 = k_1^0 e^{i\omega t}, \quad k_2 = k_2^0 e^{i\omega t}, \quad k_3 = k_3^0 e^{i\omega t}$$

$$\begin{cases} \frac{dk_1}{dt} + qB \left(\frac{k_2}{m_2} \gamma - \frac{k_3}{m_3} \beta \right) = 0 & i\omega k_1^0 + \frac{qB\gamma}{m_2} k_2^0 - \frac{qB\beta}{m_3} k_3^0 = 0 \\ \frac{dk_2}{dt} + qB \left(\frac{k_3}{m_3} \alpha - \frac{k_1}{m_1} \gamma \right) = 0 & i\omega k_2^0 + \frac{qB\alpha}{m_3} k_3^0 - \frac{qB\gamma}{m_1} k_1^0 = 0 \\ \frac{dk_3}{dt} + qB \left(\frac{k_1}{m_1} \beta - \frac{k_2}{m_2} \alpha \right) = 0 & i\omega k_3^0 + \frac{qB\beta}{m_1} k_1^0 - \frac{qB\alpha}{m_2} k_2^0 = 0 \end{cases}$$

k_1^0, k_2^0, k_3^0 有非零解，系数行列式为零

$$\begin{cases} i\omega k_1^0 + \frac{qB\gamma}{m_2} k_2^0 - \frac{qB\beta}{m_3} k_3^0 = 0 \\ i\omega k_2^0 + \frac{qB\alpha}{m_3} k_3^0 - \frac{qB\gamma}{m_1} k_1^0 = 0 \\ i\omega k_3^0 + \frac{qB\beta}{m_1} k_1^0 - \frac{qB\alpha}{m_2} k_2^0 = 0 \end{cases} \quad \begin{vmatrix} i\omega & \frac{qB\gamma}{m_2} & -\frac{qB\beta}{m_3} \\ -\frac{qB\gamma}{m_1} & i\omega & \frac{qB\alpha}{m_3} \\ \frac{qB\beta}{m_1} & -\frac{qB\alpha}{m_2} & i\omega \end{vmatrix} = 0$$

$$i\omega \left\{ -\omega^2 + \frac{(qB)^2}{m_2 m_3} \alpha^2 + \frac{(qB)^2}{m_1 m_2} \gamma^2 + \frac{(qB)^2}{m_1 m_3} \beta^2 \right\} = 0$$

$\omega = 0$ 无意义

$$\text{旋转频率 } \omega = qB \sqrt{\frac{1}{m_2 m_3} \alpha^2 + \frac{1}{m_1 m_2} \gamma^2 + \frac{1}{m_1 m_3} \beta^2}$$

$$\omega = qB \sqrt{\frac{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}{m_1 m_2 m_3}} \quad \omega = \frac{qB}{m^*}$$

$$\text{其中 } m^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}}$$

5.6 若已知 $E(k) = Ak^2 + c(k_x k_y + k_y k_z + k_z k_x)$ ，导出 $\mathbf{k}=0$ 点上的有效质量张量，并找出

主轴方向

解 先求有效质量张量

$$p = \begin{bmatrix} 2A & C & C \\ C & 2A & C \\ C & C & 2A \end{bmatrix} \quad |p - 2A| = \begin{bmatrix} 2A - \lambda & C & C \\ C & 2A - \lambda & C \\ C & C & 2A - \lambda \end{bmatrix} = 0$$

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 2A - C \quad \lambda_3 = 2A + 2C$$

故求有效质量张量为

$$\frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} 2A - C & 0 & 0 \\ 0 & 2A - C & 0 \\ 0 & 0 & 2A + 2C \end{bmatrix}$$

$k=0$ 时的有效质量张量为

$$\hbar^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{2A - C} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2A - C} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2A + 2C} \end{bmatrix}$$

接着求主轴方向 $(P - \lambda E)X = 0$

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 2A - C \text{ 时 } \begin{bmatrix} C & C & C \\ C & C & C \\ C & C & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = 0 \text{ 得 } \alpha_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_3 = 2A + 2C \text{ 时, 同理可得 } \alpha_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \text{ 但 } \alpha_1 \text{ 和 } \alpha_2 \text{ 不正交, 故需正交化}$$

$$\beta_1 = \alpha_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \text{ 则 } \beta_2 = \alpha_2 - \frac{(\alpha_2 \beta_1)}{(\beta_1 \beta_1)} \beta_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

单位化得三个主轴方向

$$\gamma_1 = \frac{\beta_1}{|\beta_1|} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{|\beta_2|} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \gamma_3 = \frac{\beta_3}{|\beta_3|} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

第六章 习题

6.1 He^3 的自旋为 $1/2$ ，是费米子。液体 He^3 在绝对零度附近的密度为 0.081gcm^{-3} 。计算费米能 E_F 和费米温度 T_F

解 在绝对零度时，近似等触面为球面

$$2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \times \frac{4\pi}{3} k_F^3 = N = \frac{0.081}{3} \times V \times N_A \times 2$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = 0.9545 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$k_F = (0.324 N_A \pi^2)^{1/3} \approx 1.25 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$T_F = E_F / k_B = \frac{0.9545 \times 10^{-18} \text{ J}}{1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}} = 6.9 \times 10^4 \text{ K}$$

6.2 在低温下金属钾的摩尔热容量的实验结果可写成 $C_e = 2.08T + 2.57T^3 \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}$

如果一个摩尔的金属钾有 $N = 6 \times 10^{23}$ 个电子，求钾的费米温度 T_F

解 一摩尔的电子对热容的贡献 $C_V = N_0 \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{E_F^0} \right) k_B$

与实验结果比较 $C_e = 2.08T + 2.57T^3 \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}$

$$N_0 \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{k_B T_F} \right) k_B = 2.08 \times 10^{-3} \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}$$

$$\text{费米温度 } T_F = N_0 \frac{\pi^2 k_B}{2 \times 2.08 \times 10^{-3}} = 19624 \text{ K}$$

6.3 若将银看成具有球形费米面的单价金属，计算以下各量

- 1) 费密能量和费密温度
- 2) 费米球半径
- 3) 费米速度
- 4) 费米球面的横截面积
- 5) 在室温以及低温时电子的平均自由程

解 1) 费密能量 $E_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$ $k_F^0 = (3\pi^2 n)^{1/3}$

$$n = \frac{10.5}{107.87} \times 10^6 \times N_A = 0.586 \times 10^{29} / m^3$$

$$m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$E_F^0 = 8.82 \times 10^{-19} \text{ J} = 5.5 \text{ eV}$$

$$\text{费密温度 } T_F = \frac{E_F^0}{k_B} = 6.4 \times 10^4 \text{ K}$$

2) 费密球半径

$$E_F^0 = \frac{(\hbar k_F^0)^2}{2m} \quad k_F^0 = \sqrt{\frac{2mE_F^0}{\hbar^2}}$$

$$E_F^0 = 8.82 \times 10^{-19} \text{ J} \quad k_F^0 = 1.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

3) 费密速度 $v_F = \frac{\hbar k_F^0}{m} \quad v_F = 1.38 \times 10^6 \text{ m/s}$

4) 费密球面的横截面积 $S = \pi(k_F^0 \sin \theta)^2 = \pi k_F^{02} \sin^2 \theta$ —— θ 是 \vec{k}_F 与 z 轴间夹角

$$k_F^0 = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad S = \pi(3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} \sin^2 \theta$$

5) 在室温以及低温时电子的平均自由程

$$\text{电导率 } \sigma = \frac{1}{\rho} \quad \frac{1}{\rho} = \frac{nq^2\tau(E_F^0)}{m}$$

$$\text{弛豫时间 } \tau(E_F^0) = \frac{m}{nq^2\rho}$$

$$\text{平均自由程 } l = v_F \tau(E_F^0) \quad l = \frac{mv_F}{nq^2\rho} = \frac{\hbar k_F}{nq^2\rho}$$

0 K 到室温之间的费密半径变化很小 $k_F = k_F^0 = 1.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$

$$q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$n = 0.586 \times 10^{29} / m^3$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$\text{平均自由程 } l = \frac{\hbar k_F^0}{nq^2\rho} \quad \text{将 } k_F^0 = 1.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \quad \text{代入}$$

$$\rho_{T=295 \text{ K}} = 1.61 \times 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$$

$$\rho_{T=20 \text{ K}} = 0.038 \times 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$$

$$l_{T=295 \text{ K}} = 5.24 \times 10^{-8} \text{ m} = 52.4 \text{ nm}$$

$$l_{T=20K} = 2.2 \times 10^{-6} m = 2.2 \times 10^3 nm$$

6.4 设 N 个电子组成简并电子气，体积为 V ，证明 $T=0K$ 时

1) 每个电子的平均能量 $\bar{U} = \frac{3}{5} E_F^0$

2) 自由电子气的压强满足 $pV = \frac{2}{3} N\bar{U}$

解 自由电子的能态密度 $N(E) = 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$

$$T=0 K, \text{ 费米分布函数 } f(E) = \begin{cases} 1 & (E \leq E_F^0) \\ 0 & (E > E_F^0) \end{cases}$$

$$\text{电子总数 } N = \int_0^\infty N(E) f(E) dE$$

$$\text{电子平均能量 } \bar{U} = \frac{\int_0^{E_F^0} EN(E) dE}{\int_0^{E_F^0} 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2} dE} \quad \bar{U} = \frac{3}{5} E_F^0$$

将电子气看作是理想气体，压强 $p = \frac{2}{3} n\bar{U}$

$$p = \frac{2}{3} \frac{N}{V} \bar{U} \quad pV = \frac{2}{3} N\bar{U}$$

6.5 如果弛豫时间 $r(k)$ 为一与 k 无关的常数。说明在电场中的一级近似解 $f_0 + f_1$ ，实际表明整个平衡分在 k 空间平移了一定的距离。

解：定态问题的波尔兹曼方程见教材 296 页 (6-55) 式。如果采取弛豫时间近似并仅加上电场，设电场强度为 ε ，则波尔兹曼方程可以简化为 (即书上 297 页 (6-58) 式)

$$-\frac{e}{\hbar} \varepsilon \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (1)$$

由此可以得到

$$f = f_0 + \frac{e\tau}{\hbar} \varepsilon \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \quad (2)$$

一般来说， ε 不是很大，是弱场。所以 f 和 f_0 差别不大，因此 (2) 式右端的 f 可以用 f_0 代替，所以 (2) 式可以写成

$$f = f_0 + \frac{e\tau}{\hbar} \varepsilon \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} \quad (3)$$

对比数学公式

$$f(r + dr) = f_0(r) + \frac{\partial f}{\partial r} \cdot dr \quad (4)$$

则 (3) 式可以化为

$$f(\mathbf{k}) = f_0 \left(\mathbf{k} + \frac{e\tau}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} \right) \quad (5)$$

从(5)式可以看出，由于认为弛豫时间 τ 是一个与 \mathbf{k} 无关的常数，所以整个分布函数在 \mathbf{k} 空间平移了一定的距离。

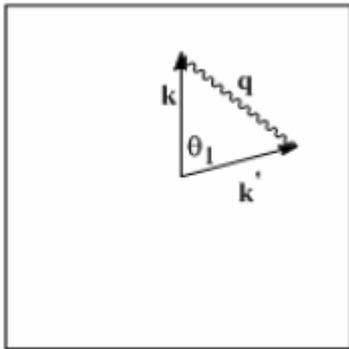
6.6 考虑球形等能面的一阶金属（布里渊区半满），设布里渊区的形状为简单立方，具体估计，电子为格波散射，在大多的散射角之内，旋转定则中 $G_n=0$

解：设波矢为 \mathbf{k} 的电子发射或是吸收动量为 \mathbf{q} 的声子之后波矢变为 \mathbf{k}' ，由于声子同时具有能量和动量，所以电子的能量和动量均不守恒。但是，由于一般来说声子所携带的能量相对于电子不大，所以这里近似认为电子发射或是吸收声子之后只改变动量，能量不变，即

$|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k_f$ ，其中 k_f 为费米波矢。换句话说，这里仅仅考虑弹性散射，波矢大小保持不变但方向改变，并且散射发生在费米面上。

由于 $G_n=0$ ，所以这里的电子 - 声子的散射过程是一个正常过程（N 过程），也就是电子散射前后其动量和声子的动量都在第一布里渊区。如果以带箭头的直线代表电子线，弯曲线代表声子线，则动量关系如右图所示（方框代表第一布里渊区，需要注意的是图中没有给出费米面）。动量三角形是一个等腰三角形。设最大的散射角为 θ_1 ，则

$$2k_f \sin \frac{1}{2}\theta_1 = q \quad (1)$$



对声子的处理取德拜模型，此时 q 有最大值 q_{\max} ，由第三章的只是可以求得

$$q_{\max} = \left(\frac{6\pi^2}{\Omega} \right)^{1/3}, \text{ 对于单价原子的金属可以求得 } k_f = \left(\frac{3\pi^2}{\Omega} \right)^{1/3}, \text{ 其中 } \Omega \text{ 是晶胞的体积。}$$

由(1)式可以得到

$$\sin \frac{1}{2}\theta_1 = q_{\max} / 2k_f = 2^{1/3} / 2$$

即

$$\theta_1 = 2 \arcsin(2^{1/3} / 2) \approx 79^\circ$$

所以在 79° 以内的范围中，选择定则中的 $G_n=0$ 。

6.7 利用波尔兹曼方程的弛豫时间近似解法

(1) 证明弱磁场并不改变电子的平衡分布，并说明其反映的物理图像

(2) 若电场 $E = (\varepsilon_x, \varepsilon_y, 0)$ ，磁场为 $H = (0, 0, H_0)$ ，求出含 E 一次方程的近似解

解：(1)，设磁感应强度为 \mathbf{B} ，则在电场磁场同时存在的情况下应该有

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1)$$

波尔兹曼方程写成

$$f = f_0 + \frac{e\tau}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \quad (2)$$

一般外界电场和磁场对于电子的作用远小于晶体中原子对于电子的作用，因而可以看成是弱场，所以(2)式右边的 f 可以用 f_0 代替，由此(2)式可以写成

$$f = f_0 + \frac{e\tau}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} \quad (3)$$

由于

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \mathbf{v} \quad (4)$$

将(4)式带入(3)式有

$$f = f_0 + \frac{e\tau}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \mathbf{v} = f_0 + e\tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{v} \quad (5)$$

因此，在一级近似下，磁场对分布函数没有贡献。其原因是在经典理论中，磁场只改变电子的运动方向，不改变电子的能量，所以从经典理论来看，磁场不改变电子的分布函数。

(2)，很显然由于一级近似下的(5)式与磁场无关，所以如果要体现磁场的影响，必须考虑更高阶的近似。设与磁场强度 \mathbf{H} 相应的磁感强度为 $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$ ，而 $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$ ，其中 μ_0 为真空磁导率，以下求解时使用磁感强度 \mathbf{B} ，最后结果中再以 \mathbf{H} 代回。

如前所述，由于一般情况下外场可以看成是弱场，所以非平衡态分布函数 f 与平衡态分布函数 f_0 差别不大，可以对 f 进行展开，即

$$f = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial E} \psi \quad (a)$$

其中 ψ 是一个小量。从第一问可以看到， ψ 的一级近似为 $\psi^1 = e\tau \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{v}$ ，在一级近似下，磁场对分布函数并无影响，如果想要求出含 \mathbf{B} 一次方的解，则要求出 ψ 的二级近似

将(a)式代入(2)式，得到

$$\frac{\partial f}{\partial E} \psi = \frac{e\tau}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \quad (6)$$

对(a)式两端求梯度，即

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} + \psi \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) + \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}} \quad (7)$$

将(4)式代入(7)式右端第一项，并忽略掉包含 ψ 的第二项（这是由于 ψ 是一个小量，所以(7)式右边的第二项可以忽略。但是，最后一项是 ψ 的导数项则不能忽略），应有

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \mathbf{v} + \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}} \quad (8)$$

将(8)式代入(6)式可以得到

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \psi = \frac{e\tau}{\hbar} (\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \mathbf{v} + \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}} \right)$$

即

$$\psi = e\tau \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{v} + \frac{e\tau}{\hbar} (\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{k}} \quad (9)$$

将(9)式右边最后一项中的 $\partial \psi / \partial \mathbf{k}$ 近似的取为 $\partial \psi^1 / \partial \mathbf{k}$ ，并考虑到 $\hbar \mathbf{k} = m^* \mathbf{v}$ ，其中 m^* 是电子有效质量，计算时同时忽略掉包含 $\boldsymbol{\varepsilon}^2$ 的项，则(9)式可以简化为

$$\psi = \frac{\hbar e \tau}{m^*} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k} + \frac{\hbar e^2 \tau^2}{m^{*2}} (\mathbf{B} \times \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \mathbf{k} \quad (10)$$

将(10)式代入(a)式有(同时考虑到 $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$)

$$f = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[\frac{\hbar e \tau}{m^*} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k} + \frac{\mu_0 \hbar e^2 \tau^2}{m^{*2}} (\mathbf{H} \times \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \mathbf{k} \right] \quad (11)$$

从上面的表达式可以看出，所求的 f 精确到了 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的一次项并同时体现了 \mathbf{H} 的影响。由第一问可知，弱磁场不改变电子的平衡分布，所以(11)式中没有出现单独的 \mathbf{H} 一次项。

第七章 习题

7.1. InSb 电子有效质量 $m_e = 0.015m$ ，介电常数 $\varepsilon = 18$ ，晶格常数 $a = 6.49 \text{ \AA}$ 。试计算：
(1) 施主的电离能；(2) 基态的轨道半径；(3) 施主均匀分布，相邻杂质原子的轨道之间发生交叠时，掺有的施主杂质浓度应高于多少？

解：(1) 由于施主电离能 E_D 是氢原子电离能 E_i 的 $\frac{m^*}{m_0\varepsilon^2}$ 倍，

$$\therefore E_D = \frac{m^* E_i}{m_0 \varepsilon} = \frac{0.014 \times 13.6}{(17)^2} (eV) = 6.59 \times 10^{-4} (eV)$$

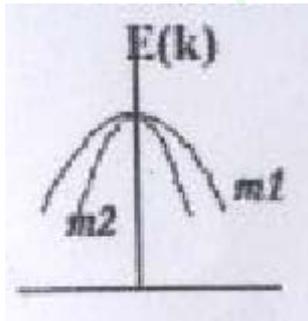
$$(2), a_0 = \frac{4\pi\hbar^2 \varepsilon_0 \varepsilon}{m^* e^2} = \frac{m_0 \varepsilon}{m^*} a_0 = \frac{17 \times 0.52}{0.014} (\text{Å}) = 6.31 \times 10^2 (\text{Å}) = 6.31 \times 10^{-8} (m)$$

(3), 如果施主的电子与类氢基态轨道发生重叠，则均匀分布于 InSb 中施主杂质浓度 N_D 就

$$\text{一定满足 } (2a)^3 N_D = 1, \therefore N_D = \left(\frac{1}{2a}\right)^3 = \frac{1}{(2 \times 6.31 \times 10^{-8})^3} = 4.98 \times 10^{20} (m^{-2})$$

7.2 设有两个价带，带顶均在 $k=0$ 且能量相等，带顶空穴有效质量有以下关系 $m_1=3m_2$ ，定性画出两者的 $E-k$ 图

解 根据带边有效质量与能带关系，在能带极值处有效质量的大小反比于能带曲率的比例关系，即有效质量越大，能带开口越大，可以定性画出两者的 $E-k$ 关系图



7.3 已知 Si 中只含施主杂质 $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 。现在 40K 下测得电子浓度为 10^{12} cm^{-3} ，试估算施主杂质的电离能

$$\text{解 我们知道电子的浓度为 } n_0 = N_D e^{-(E_C - E_F)/k_B T} \quad (a)$$

又因为在 40K 的低温下，载流子将主要是有施主激发到导带的电子。在这种情况下，导带中电子数目显然和空的施主能级数目相等。因此

$$n_0 = N_D [1 - f(E_D)] = N_D \frac{1}{1 + e^{(E_F - E_D)/k_B T}} \quad (b)$$

由以上 a 和 b 两式可得

$$n_0 = \frac{N_D}{1 + \frac{n_0}{N_C} e^{(E_F - E_D)/k_B T}} \quad (c)$$

将 c 式中的 $E_C - E_D$ 导带底施主能级的能量差，显然它就是施主的电离能

$$E_i = E_C - E_D \quad (d)$$

将 d 代入 c，并整理得到

$$E_i = k_B T \ln \frac{(N_D - n_0) N_C}{n_0^2} \quad (e)$$

由于 $N_C \propto T^{3/2}$ ，而又知 $N_C(300K) = 2.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ，故有

$$N_C(40K) = \left(\frac{40}{300}\right)^{3/2} \times 2.6 \times 10^{19} = 1.266 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

由此可知施主杂质的电离能为

$$E_i = 1.381 \times 10^{-23} \times 40 \ln \frac{(10^{15} - 10^{12}) \times 1.266 \times 10^{18}}{10^{24}} = 1.156 \times 10^{-20} \text{ J} = 0.0722 \text{ eV}$$

7.4 某一 N 型半导体电子浓度为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ，电子迁移率为 $1000 \text{ cm}^2 / \text{V} \cdot \text{s}$ 。求其电阻率

$$\text{解 } \rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{ne\mu_e} = \frac{1}{1 \times 10^{15} \times 10^6 \times 1.602 \times 10^{-19} \times 1000 \times 10^{-4}} = 62.42 \Omega \cdot \text{m}$$

7.5 已知 $T=300\text{K}$ 硅的本征载流子浓度 $n_i = 1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ 硅的 PN 结 N 区掺杂为

$$N_D = 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}，\text{P 区的掺杂为 } N_A = 1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}，\text{求平衡时的势垒高度}$$

解 $T=300\text{K}$ 时，硅 PN 结的接触电势差为

$$\begin{aligned} V_D(\text{Si}) &= \frac{k_B T}{e} \ln \left(\frac{N_D N_A}{n_i^2} \right) \\ &= \frac{1.381 \times 10^{-23} \times 300}{1.602 \times 10^{-19}} \ln \left(\frac{1.5 \times 10^{16} \times 1.5 \times 10^{18}}{(1.5 \times 10^{10})^2} \right) \\ &= 0.18 \text{ eV} \end{aligned}$$